XXVIII МЕЖДУНАРОДНАЯ
НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«НЕЙРОИНФОРМАТИКА-2026»

СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

19-23 октября 2026 г.

г. Долгопрудный, Московская область

Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)

РОССИЙСКАЯ НЕЙРОСЕТЕВАЯ АССОЦИАЦИЯ

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ГОСУДАРСТВЕННАЯ КОРПОРАЦИЯ ПО АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ «РОСАТОМ»

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЯДЕРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ «МИФИ»

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

НИЦ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ» – НИИСИ

ARTIFICIAL INTELLIGENCE RESEARCH INSTITUTE

НЕЙРОИНФОРМАТИКА-2026

XXVIII МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

МОСКВА

УДК 001(06)+004.032.26(06)
ББК 72я5+32.818я5
М 82

XXVIII МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «НЕЙРОИНФОРМАТИКА-2026»: сборник научных трудов. М.: НИЯУ МИФИ, 2026. – 508 с.

Сборник научных трудов содержит доклады, включенные в программу XXVIII МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ «НЕЙРОИНФОРМАТИКА-2026», проходившей 19–23 октября 2026 г. в Московском физико-техническом институте (национальном исследовательском университете) (МФТИ).

Тематика конференции охватывает широкий круг вопросов: методические вопросы нейроинформатики, теория нейронных сетей и глубокое обучение, нейробиология, модели адаптивного поведения и когнитивные исследования, нейроморфные вычисления, применение нейронных сетей в компьютерном зрении, управлении, обработке естественного языка и многих других приложениях.

Конференция проводилась при поддержке программы «Приоритет 2030».

Ответственные редакторы *Г.А. Бесхлебнова, З.Б. Сохова*

Статьи получены до 31 июля 2026 г.
Материалы издаются в авторской редакции.

ISBN 978-5-7262-3301-7

© *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», 2026*

Оригинал-макет подготовлен *М.В. Макаровой*

Подписано в печать 16.10.2026. Формат 60×84 1/16.
Печ. л. 31,75. Тираж 100 экз. Изд. № 028-2. Заказ № 258.

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
Типография НИЯУ МИФИ
115409, Москва, Каширское ш., 31

ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ

- Российская нейросетевая ассоциация
- Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (НИЯУ МИФИ)
- Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
- Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
- НИЦ «Курчатовский институт» − НИИСИ
- Государственная корпорация по атомной энергии «Росатом»
- Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), МАИ
- Институт искусственного интеллекта AIRI

ПОЧЁТНЫЙ ПРЕДСЕДАТЕЛЬ КОНФЕРЕНЦИИ

Чл.-корр. РАН Ковальчук Михаил Валентинович – президент НИЦ «Курчатовский институт», Москва

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ КОНФЕРЕНЦИИ

Чл.-корр. РАН Крыжановский Борис Владимирович – председатель координационного совета Российской нейросетевой ассоциации, НИЦ «Курчатовский институт» – НИИСИ, Москва

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ

Председатель – Жилоков Азамат Хасанбиевич (МФТИ, Москва)

Зам. председателя – Юдин Дмитрий Александрович (МФТИ, AIRI, Москва)

Зам. председателя – Климов Валентин Вячеславович (НИЯУ МИФИ, Москва)

Акопов Эдмунд Иванович – НИЦ «Курчатовский институт» – НИИСИ, Москва

Карандашев Яков Михайлович – НИЦ «Курчатовский институт» – НИИСИ, Москва

Киселев Михаил Витальевич – Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова, Чебоксары

Смирнитская Ирина Аркадьевна – НИЦ «Курчатовский институт» – НИИСИ, Москва

Сохова Зарема Борисовна – НИЦ «Курчатовский институт» – НИИСИ, Москва

Трофимов Александр Геннадьевич – НИЯУ МИФИ, Москва

Тюменцев Юрий Владимирович – Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)

Ученый секретарь Бесхлебнова Галина Александровна – НИЦ «Курчатовский институт» – НИИСИ, Москва

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ

Председатель – Оселедец Иван Валерьевич (МГУ имени М.В. Ломоносова, AIRI, Москва)

Сопредседатель – Визильтер Юрий Валентинович (Государственный научно-исследовательский институт авиационных систем, Москва, МФТИ, Москва)

Зам. председателя – Дунин-Барковский Виталий Львович (МФТИ, НИЦ «Курчатовский институт» – НИИСИ, Москва)

Зам. председателя – Редько Владимир Георгиевич (НИЦ «Курчатовский институт» – НИИСИ, Москва)

Зам. председателя – Тюменцев Юрий Владимирович (Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет))

Члены Программного комитета

Golovko Vladimir Adamovich – Brest State Technical University, Belarus

Yixin Zhu – PKU CoRe Lab, Peking University, China

Академик РАН Анохин Константин Владимирович – Институт перспективных исследований мозга МГУ имени М.В. Ломоносова

Академик РАН Балабан Павел Милославович – Институт высшей нервной деятельности и нейрофизиологии РАН, Москва

Бурцев Михаил Сергеевич – London Institute for Mathematical Sciences, United Kingdom

Введенский Виктор Львович – НИЦ «Курчатовский институт», Москва

Доленко Сергей Анатольевич – НИИ ядерной физики имени Д.В. Скобельцына МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Ежов Александр Александрович – Государственный научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований (ГНЦ РФ ТРИНИТИ), Москва

Каганов Юрий Тихонович – Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана

Кирой Валерий Николаевич – Научно-исследовательский технологический центр нейротехнологий Южного федерального университета, Ростов-на-Дону

Литинский Леонид Борисович – независимый исследователь, Хайфа, Израиль

Макаренко Николай Григорьевич – Главная (Пулковская) астрономическая обсерватория Российской академии наук, Санкт-Петербург

Мишулина Ольга Александровна – Российская нейросетевая ассоциация, Москва

Панов Александр Игоревич – Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» РАН, МФТИ, AIRI, Москва

Самсонович Алексей Владимирович – Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

Терехов Сергей Александрович – РАНИ, РАИИ

Трофимов Александр Геннадьевич – Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

Тюменцев Юрий Владимирович – Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)

Ушаков Вадим Леонидович – Институт перспективных исследований мозга МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Шапошников Дмитрий Григорьевич – Научно-исследовательский технологический центр нейротехнологий Южного федерального университета, Ростов-на-Дону

Шепелев Игорь Евгеньевич – Научно-исследовательский технологический центр нейротехнологий Южного федерального университета, Ростов-на-Дону

Шумский Сергей Александрович – Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Юдин Дмитрий Александрович – Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), AIRI, Москва

Юров Артем Валерианович – Балтийский федеральный университет имени И. Канта, Калининград

Яхно Владимир Григорьевич – Институт прикладной физики РАН, Нижний Новгород

Уважаемые коллеги!

Конференция НЕЙРОИНФОРМАТИКА вновь собирает исследователей, работающих по актуальным направлениям теории и приложений искусственных нейронных сетей. Как и на предыдущих наших собраниях, в этом году на конференции НЕЙРОИНФОРМАТИКА-2026 представлены доклады по проблемам теории нейронных сетей, нейробиологии, моделям адаптивного поведения, нейросетевому моделированию объектов и систем, обработке статистических данных, временных рядов и изображений и многим другим прикладным задачам нейроинформатики. Конференция уделяет внимание и таким животрепещущим темам, как искусственный интеллект, машинное обучение, большие языковые модели.

Более 250 российских ученых и наших зарубежных коллег направили в оргкомитет конференции результаты своих исследований.

По сложившейся традиции конференцию открывают приглашенные доклады. В рамках школы-семинара участники конференции прослушают лекции известных специалистов по актуальным проблемам нейроинформатики. Круглые столы «Нейрозой: что делать?» и «Генеративные модели для робототехнических симуляторов и цифровых двойников на производстве» станут площадкой для обсуждения актуальных вопросов развития искусственного интеллекта, возможностей и ограничений генеративных моделей, а также перспектив их применения в робототехнике и промышленности.

Особое внимание уделяется работам студентов, аспирантов и молодых специалистов, которые примут участие в творческом конкурсе.

За прошедшие годы конференция НЕЙРОИНФОРМАТИКА сложилась как представительный и многоплановый по тематике научный форум. В его работе принимают участие и известные ученые, и молодые специалисты, аспиранты и студенты. Желаем всем участникам конференции плодотворной работы, активного сотрудничества и новых творческих идей.

Оргкомитет

СОДЕРЖАНИЕ

Секция

ГЛУБОКОЕ ОБУЧЕНИЕ

SYROVATKIN S.
Enhancing wood defect detection through synthetic data generation and FID-based filtering 13

Секция

ИНТЕРФЕЙС МОЗГ-КОМПЬЮТЕР. НЕЙРОТЕХНОЛОГИИ

ШАПОШНИКОВ П.Д., ЩЕРБАНЬ И.В.
Метод пространственной интерполяции ЭЭГ-сигналов с помощью сети радиальных базисных функций для идеомоторных паттернов в мобильных интерфейсах мозг-компьютер 28
РЫБАЛКО А.В., БАБИЧ Н.А., ФРАДКОВ А.Л.
Кибернетическая нейробиология и экспериментальный стенд для исследования нейроинтерфейсов 38
DEEB M.
A multidimensional neural fingerprint of imagined words from EEG: integrating temporal, spatial, spectral, and explainable-AI evidence 49

Секция

НЕЙРОКОМПЬЮТЕРЫ, НЕЙРОМОРФНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ И ИМПУЛЬСНЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ

ХАМИТОВ К.А., РЫНДИН Е.А., АНДРЕЕВА Н.В.
Аппаратное исполнение импульсных нейроморфных архитектур, ориентированных на повышение энергоэффективности устройств периферийного искусственного интеллекта 60
КОНСТАНТИНОВА Д.А., ГАРАМОВ К.А., ЛОБОВ С.А.
Исследование протоколов кодирования в импульсном нейроне с пластичностью STRDP 71
ТАРКОВ М.С.
Вычисления в физических резервуарах на основе мемристоров: краткий обзор 81

ДУДКИН А.П., РЫНДИН Е.А., АНДРЕЕВА Н.В.
Оценка энергоэффективности импульсных и формальных нейросетей в цифровом и аналоговом аппаратном исполнении 91
КАРИМУЛЛИНА Л.Б., КВАШНИН Д.Г., БРИЛЛИАНТОВ Н.В.
Квантовая теория диффузионных мемристоров: аналитический и первопринципный подходы 102

Секция

НЕЙРОННЫЕ СЕТИ В КОМПЬЮТЕРНОМ ЗРЕНИИ И СЕНСОРНЫХ СИСТЕМАХ

ЕРМАКОВ И.А., КАНЕВ А.И.
Влияние характеристик обучающих данных на качество U-Net при сегментации аэрофотоснимков 111
MAKSIMOVA A.Y., CHERNYADIEV I.V., LAMCEV O.A.
An interpretable hybrid neural-symbolic system for monitoring regulated actions in industrial video streams..... 121
ГРОМОВОЙ С.С., АРУТЮНЯН А.Г., АНДРУЛИС В.В., ГУБА А.В., КОВАЛЁВ Н.А., ХАЛИД В., ЛЕВИЧЕВ М.Ю., КАЗАНЦЕВ В.Б.
Трёхмерный гауссов сплаттинг для синтеза эгоцентрических изображений в манипуляционных задачах гуманоидных роботов..... 134

Секция

НЕЙРОННЫЕ СЕТИ В МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ И УПРАВЛЕНИИ

НОСОВ А.С., ГАБДРАХМАНОВА Н.Т.
Сравнительный анализ параметрических и нейросетевых моделей в задачах оценки Value-at-Risk на российском рынке 143
STENKIN D.A., GORBACHENKO V.I.
Finding eigenvalues on physics informed radial basis function networks..... 153
RUCHKIN K.A.
Contrastive Loss p-Laplacian Propagation method for classifying regular regimes in Hamiltonian systems on the Poincaré sections..... 164

Секция

НЕЙРОННЫЕ СЕТИ В МОЛЕКУЛЯРНОЙ БИОЛОГИИ И ФАРМАКОЛОГИИ

АНТОНОВ В.Д., КОЧКАРОВ А.А.
Применение спектральных графовых вейвлетов для предсказания белок-белковых взаимодействий 176

Секция

НЕЙРОННЫЕ СЕТИ В ОБРАБОТКЕ ЕСТЕСТВЕННОГО ЯЗЫКА. БОЛЬШИЕ ЯЗЫКОВЫЕ МОДЕЛИ

МАЛЫХ В.А.
Суммаризация диалогов 188
ФАЗУЛЬЯНОВ Д.В., ГУСЕВА А.И.
Мультимодальный сентимент-анализ коммуникаций в продуктовых IT-командах: роль спикер-диаризации и детекции иронии 199
МАРТИРОСЯН З.К., МАЦАКОВ Б.В., КОНОВАЛОВ М.А., КАРАСАЕВ Д.С., МАЛЫХ В.А.
Применение верификаторов для улучшения качества ответов на открытые вопросы с использованием базы знаний 209
ЛИНЬ Ю.
Распознавание ключевых слов русского языка в режиме нулевого обучения на основе межмодального предобученного выравнивания 219
SUNGUROVA A., ISAEVA E.
Cognitively-oriented management of large language models for cross-genre text adaptation 227
DEROY A.
GNFF: a graph-based negative feedback fine-tuning technique to prevent deceptive alignment in large language models 238

Секция

НЕЙРОННЫЕ СЕТИ И КОГНИТИВНЫЕ НАУКИ

ПРОСКУРА А.Л., ЛИСАЧЕВ П.Д., РАТУШНЯК А.С.
Инсулин и поддержание баланса возбуждения/торможения в мозге 247

ДЕМКИНА Е.И., МИХЕЙКИН М.Е., ГОРШКОВА Т.А.,
АЛЕКСЕЕВА В.М., ТАРАСОВА Д.М., МИТЮРЕВА Д.Г.,
СКРИПКИНА С.М., АБРОСИМОВА В.Д., КИСЕЛЬНИКОВ А.А.
Глубокое обучение на функциональной связности
корковых ЭЭГ-источников предсказывает
уровень подвижного интеллекта 256
ПИВОВАРОВ И.О.
TEVSER: теория эволюции само-репрезентаций 266

Секция

НЕЙРОСЕТЕВЫЕ ПАРАДИГМЫ И АРХИТЕКТУРЫ

СЛЕПОВИЧЕВ И.И.
Самоподобные нейронные сети глубокого обучения
для авторегрессионного языкового моделирования 292
ДОРОГОВ А.Ю.
Ортогональные нейронные сети быстрого обучения 302
ДРОЗДОВ Д.П., ЯКОВЛЕВ К.С.
Механизм самовнимания для обучения
эвристических функций поиска на графах Кэли..... 318
АНАНИКЯН А.Г., ЯКОВЛЕВ К.С.
Влияние обучающих данных на качество нейросетевой эвристики
в среде PushWorld..... 327

Секция

ОБУЧЕНИЕ С ПОДКРЕПЛЕНИЕМ В НЕЙРОБИОЛОГИИ И В СИСТЕМАХ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА

ЛЮБИН М.В., ЯКОВЛЕВ К.С.
Повышение эффективности алгоритма PPO
в задаче PushWorld за счёт модификации среды 336
ЗВОНАРЕВ И.С., КАРАВАЕВ Ю.Л.
Применение алгоритма обучения с подкреплением TD3
в задаче планирования траектории движения
неполноприводного сфероробота..... 346
СВИРИДОВ Н.Н., БАЗЕНКОВ Н.И.
Управление скелетно-мышечной моделью человека
на основе методов обучения с подкреплением 359

ЛЯТИФОВ Р.Э.
Знаниевый и интеграционный дефицит:
диагностика узкого места переноса у агента с моделью мира 369

Секция

ПРИКЛАДНЫЕ НЕЙРОСЕТЕВЫЕ СИСТЕМЫ

МАРЬЯСИН О.Ю., ТИХОМИРОВ Л.И.
Доработка генеративных нейронных сетей для анализа аномалий
в данных об энергопотреблении 378
ФИЛИППОВ И.И.
Доверенное OCR-распознавание на основе калибровки уверенности
и выборочного принятия результатов 389
КАНЕВ А.И.
Кластеризация фрагментов на стороне клиента в браузере
для локальной мультимодальной RAG-системы 399
LIANG C., PRIBADI P.O.A.
TranAD-ensemble with top-k aggregation
for critical transition analysis in complex systems 408
ЮДКИН Ф.А., ФИРСОВ А.А., ОРАНОВ А.А.
Распределенная нейроморфная система принятия решений
на основе планарных мемристорных структур 418
ГЕРГЕДАВА Д.А., КАРАНДАШЕВ Я.М., МЫСИН И.Е.
Граф посещённых областей для выбора промежуточных целей
при навигации в среде с препятствиями 431
FANDRESENA R.M., GAVRILOV A.I.
Dual-stage computational modeling for radioligand therapy:
extrapolating macro-kinetic and structural affinities
from prostate to breast cancer receptors..... 440

Секция

СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ И ТЕХНОЛОГИИ В НЕЙРОБИОЛОГИИ

ГАЛЬТЯЕВ А.В., СВАРНИК О.Е.
Оценка процессов обучения мышей питьевой задаче
в виртуальной реальности на основе комплекса
поведенческих метрик 457

ГРАЧЕВ Д.Р., ВИНОГРАДОВА Л.В.,
СУЛЕЙМАНОВА Е.М., СЫСОЕВ И.В.
Различение дельта- и тета-ритмов сигналов
локальных потенциалов мозга животных 467

Секция

ТЕОРИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

WANG S., LI S., SMOLIN V.S.
Neural mapping of hidden-layer activity spaces
and orthogonalization conditions in deep neural networks 474

Секция

**ЭВОЛЮЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
И МНОГОАГЕНТНЫЕ СИСТЕМЫ**

SKOBTSOV YU., SKOBTSOV V.
Evolutionary probabilistic algorithms
vs Evolutionary quantum algorithms 484
МУСАЕВ М.Ш., ТЮГОВА В.И., ГУРЬЯНОВ Д.О., ВОЛОСОВА А.В.
Критерии когнитивной интерпретации
адаптивного поведения Physarum polycephalum 495

Именной указатель авторов 505

Секция

Глубокое обучение

S. SYROVATKIN
Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University),
Dolgoprudny
ssyrovatkin@yandex.ru

ENHANCING WOOD DEFECT DETECTION THROUGH SYNTHETIC DATA GENERATION AND FID-BASED FILTERING

This study addresses the problem of improving wood defect detection when annotated real data is scarce. Our primary goal is to enhance YOLO-based detection (5 classes: Knot, Crack, Quartzity, Resin, Marrow) by augmenting real training data with synthetic images generated by a bounding box-guided diffusion model. To ensure that only high-quality synthetic samples are used, we apply FID-based filtering to the generated data. We compare two filtering approaches: global filtering (selecting top images regardless of class) and per-class filtering (selecting top images for each class individually). Experiments are conducted on 7 training set sizes ranging from 100 to 12,000 real images. Our findings reveal that the optimal filtering method depends on dataset size: global filtering performs better on medium-sized datasets (2,000−8,000), while per-class filtering achieves superior results on small (100−1,000) and large (12,000) datasets. To improve rare class detection (Quartzity, Marrow), we apply oversampling, increasing their representation from 2−3 to 7−8 % of total objects. This yields a substantial improvement for Quartzity: +10.2 percentage points mAP (from 3.2 to 13.5 %) on 100 real images and +4.3 percentage points on 2,000 images. Furthermore, we investigate a triple-scale generation strategy (3× synthetic volume) followed by filtering. The optimal filtering threshold varies with dataset size: aggressive filtering (70 % retention) works best for 100 images, while moderate filtering (50 % retention) is optimal for 4,000−12,000 images. The highest mAP values observed in our experiments reach 48.66 % on 4,000 images and 50.71 % on 12,000 images. We note that all results correspond to single training runs and statistical significance was not assessed.

Keywords: *Diffusion Models, Synthetic Data, FID Filtering, Object Detection, YOLO, Rare Classes.*

Introduction

Modern object detection methods, such as YOLO, critically depend on the volume and quality of annotated training data. Collection and annotation, especially in industrial settings, remain expensive, particularly for rare defect classes that are underrepresented in real-world datasets.

Wood defect detection has been studied using various computer vision approaches, ranging from classical feature-based methods to modern deep learning architectures [1, 2, 3]. However, industrial wood inspection presents unique challenges: defect classes are highly imbalanced (e.g., knots dominate while Quartzity and Marrow are rare), annotation requires domain expertise, and imaging conditions vary across production lines. These factors make data augmentation particularly relevant for this domain.

Our pipeline combines bounding box-guided diffusion generation, iFID-based filtering, and YOLO detector training, with detection mAP on a fixed test set as the primary evaluation metric.

A promising direction to overcome data scarcity is the use of synthetic images generated by deep learning models [4]. Recently, diffusion models have demonstrated impressive capabilities in generating photorealistic images and are actively being explored for data augmentation tasks [5, 6]. However, most existing approaches lack precise control over object placement. We adopt the method of Caruso, Simoni and Pelosin [7], which synthesizes images conditioned on bounding boxes using Bounding Box-Aware Signed Distance (BASD) maps.

Nevertheless, as shown in [8, 9], low-quality synthetic data can degrade detector performance. Thus, selective filtering of the most valuable synthetic data is essential. The Fréchet Inception Distance (FID) is a standard metric for generation quality [5, 10], and lower-FID images lead to greater improvements in downstream tasks [11, 12]. However, systematic studies on how filtering strategy (global vs. class-balanced) and synthetic data volume affect detector accuracy remain limited.

In this work, we conduct a systematic study of FID-based filtering for wood defect detection. We compare global filtering (selecting top images regardless of class) and per-class filtering (selecting top images per class). Experiments cover seven training set sizes (100 to 12,000 real images). We also investigate oversampling for rare classes and triple-scale generation followed by aggressive filtering [13]. Our results provide practical recommendations for choosing optimal filtering strategies based on available real data volume.

1. Related Work

1.1. Synthetic Data Augmentation for Object Detection

Data scarcity remains a fundamental challenge in training object detection models, particularly in industrial domains where annotation is expensive and time-consuming. Traditional augmentation techniques (rotations, scaling, color jittering) are limited in their ability to generate novel semantic diversity, as they operate at the pixel level and do not create new object configurations or scene compositions [4].

Recent advances in generative modeling have opened new possibilities for data augmentation. Diffusion models have emerged as a powerful approach, demonstrating superior performance over GANs in generating photorealistic and diverse images [14]. These models have been successfully applied to various downstream tasks, including object detection and segmentation.

For industrial applications, precise control over object placement is crucial. Caruso, Simoni, and Pelosin [7] proposed a method for synthesizing industrial images and segmentation maps conditioned on bounding boxes. Their approach leverages Bounding Box-Aware Signed Distance (BASD) maps to encode spatial information, ensuring accurate alignment between generated images and their annotations. This method serves as the foundation for synthetic data generation in our work.

Several recent works have explored synthetic data generation for detection tasks. Feng et al. [6] presented InstaGen; Patricio [11] introduced FLORA for low-data regimes; Liu et al. [13] proposed diverse instance generation for few-shot detection. In domain-specific settings, Tang et al. [15], Chen et al. [16], and Zhu et al. [17] applied diffusion models to remote sensing and general detection. These methods primarily target text-conditioned generation, whereas our work focuses on bounding-box-conditioned synthesis for industrial defect detection. We also note that Copy-Paste augmentation [18], while effective, requires instance segmentation masks unavailable in our dataset.

Despite these advances, the effectiveness of synthetic data critically depends on its quality. Nie et al. [8] emphasized that diversity in generation must be balanced with semantic coherence to ensure usefulness for downstream tasks. Similarly, Xie et al. [9] showed that incorporating unrealistic or poorly generated images into the training set can degrade the generalization ability of the detector. These findings underscore the necessity of selective filtering of synthetic samples.

1.2. Metrics for Evaluating Generation Quality

Evaluating the quality of generative models requires measuring the similarity between distributions of real and generated data. The most widely adopted metric is the Fréchet Inception Distance (FID) [10], which computes the Wasserstein-2 distance between multivariate Gaussians approximating features of real and synthetic images extracted by an Inception network. FID correlates well with human perception and has become the standard benchmark in the field.

However, FID conflates two distinct aspects of generation quality: fidelity (realism) and diversity. To address this limitation, improved precision and recall metrics have been proposed [5]. These metrics separately assess the proportion of generated samples that appear realistic (precision) and how well the generated samples cover the diversity of real data (recall). Plas, Lin, and Zhan [5] introduced a unified fidelity metric for synthetic imagery, providing a more comprehensive evaluation framework.

An important consideration is that FID does not always correlate with downstream task performance. Nie et al. [8] observed that improving FID does not guarantee improved detector mAP, a finding that motivates our use of multiple evaluation metrics.

1.3. Addressing Class Imbalance

Traditional oversampling methods such as SMOTE [19] interpolate minority class examples but may produce noisy samples [20]. In object detection, Ahmed et al. [12] proposed E-IRFS, an instance-aware repeat factor sampling method effective for long-tailed detection in UAV scenarios.

In the generative modeling paradigm, oversampling of rare classes can be achieved either by increasing the generation volume for these classes or by targeted filtering that preserves rare class samples while removing low-quality samples from frequent classes. Our study systematically investigates both strategies.

1.4. Synthetic Data Filtering

Since not all generated images are equally useful for downstream tasks, filtering is essential. Several approaches have been proposed to select high-quality synthetic samples. Jeong et al. [21] proposed SGGA, which filters generated images using CLIP similarity and LPIPS distance to ensure semantic and visual quality. Nie et al. [8] emphasized the importance of maintaining semantic coordination while filtering to preserve diversity.

However, existing approaches to synthetic data filtering have notable limitations. First, they do not systematically investigate how the optimal filtering strategy depends on the volume of available real data. Second, they do not compare global filtering (selecting best images regardless of class) with per-class filtering, which is particularly important for class-imbalanced tasks. Our work addresses these gaps by conducting a systematic comparison across seven dataset sizes and evaluating both filtering strategies.

2. Methodology

2.1. Baseline Generation Framework

The baseline synthetic data generation method follows the approach of Caruso, Simoni, and Pelosin [7], which employs a bounding box-guided diffusion model to synthesize industrial images and corresponding segmentation maps. This method ensures precise spatial alignment between generated images and their annotations.

Model Architecture. The method is built upon a DDPM (Denoising Diffusion Probabilistic Model) [14] with a U-Net architecture featuring attention mechanisms at specific levels, enabling effective capture of both local and global dependencies in images. A key innovation is the use of Bounding Box-Aware Signed Distance (BASD) maps to encode spatial information about objects. BASD maps represent signed distances to the nearest bounding box boundary, allowing the model to precisely understand where objects should be located.

Model Training. Separate diffusion models were trained for each training set size (100, 500, 1,000, 2,000, 4,000, 8,000, and 12,000 real images). This allows investigation of how generation quality and downstream detection depend on the volume of available real data.

In all cases, generation uses the same bounding boxes and class maps as the training set. The complete pipeline is evaluated end-to-end with detection mAP as the primary metric.

2.2. iFID-Based Filtering

The Fréchet Inception Distance (FID) [10] is a standard metric for evaluating the quality of generative models. By definition, FID is computed between two distributions of images: it measures the Wasserstein-2 distance between multivariate Gaussians fitted to Inception-v3 features of real and generated image sets.

In this work, we adapt the FID concept for *per-image* quality scoring. For each synthetic image x_i, we extract its Inception-v3 feature vector $\boldsymbol{f_i} \in R^{2048}$ and compute its distance to the real feature distribution:

$$iFID(x_i) = \|\boldsymbol{f_i} - \boldsymbol{\mu_r}\|^2 + Tr(\boldsymbol{\Sigma_r}),$$

where $\boldsymbol{\mu_r}$ and $\boldsymbol{\Sigma_r}$ are the mean and covariance of Inception features computed on the real training set. This formulation corresponds to the FID formula where the synthetic distribution degenerates to a single point (zero covariance). We emphasize that iFID is **not** the standard FID metric but a per-image adaptation; we use the prefix "i" to distinguish it. Similar per-image scoring approaches have been used in [22] for rethinking FID evaluation.

Images are sorted by ascending iFID (best to worst), and a specified percentage of top images is retained. We explore retention rates of 30, 40, 50, 60, 70 and 100 % (no filtering).

Two filtering strategies are implemented:

1) **Global filtering** – top images are selected from the entire synthetic dataset regardless of class;

2) **Per-class filtering** – iFID is computed separately for each class against real images of the same class. Top-k selection is performed independently per class, preserving the original class distribution.

Notation. Throughout the paper, we use the notation "iFID-filter, retain X %" to indicate that the top X% of images by iFID score are kept. For example, "iFID-filter, retain 70 %" means 30% of images are removed. In tables, this is abbreviated as "Retain 70 %".

2.3. Oversampling for Rare Classes

In our dataset, two defect classes – Quartzity and Marrow – are extremely rare, comprising less than 3 % of total objects (2.4 and 1.9 %, respectively), while the majority class Knot accounts for over 80 %.

To improve rare class detection, we apply oversampling with a target distribution of 7–8% for rare classes. Two mechanisms are used:

1) **Increased generation volume** – the number of synthetic samples for Quartzity and Marrow is increased by a factor of 2–5× for small datasets (100–500 images) and 1.2–1.5× for large datasets (4,000–12,000);

2) **Targeted filtering** – per-class filtering automatically preserves rare class samples, preventing their disproportionate removal due to higher FID.

3. Experimental results

3.1. Experimental Setup

Dataset Description. Experiments are conducted on a wood defect detection dataset containing five classes: Knot, Crack, Quartzity, Resin, and Marrow. Images were captured under real industrial conditions and annotated with bounding boxes for object detection. The total annotated dataset comprises approximately 20,000 images.

Train / Validation / Test Split. All experiments use a fixed data split to ensure reproducibility and fair comparison of results:

- **Training set** – 70 % of total data (≈ 14,000 images). Nested subsets of sizes 100, 500, 1,000, 2,000, 4,000, 8,000, and 12,000 images are formed from this set to investigate the dependence of detection quality on data volume;
- **Validation set** – 500 images (2.5 % of total data). Fixed across all experiments, used for early stopping and model selection;
- **Test set** – 4,000 images (20 % of total data). Fixed across all experiments, used for final detection quality evaluation.

The fixed nature of validation and test sets ensures fair comparison across all experiments.

Synthetic Data. Synthetic data generation is performed separately for each training set size using the corresponding diffusion model (see Section 3.1). For each size, two synthetic data regimes are generated:

- **Mix 1:1** – number of synthetic images equals the real dataset size (e.g., 100 real + 100 synthetic);
- **Triple-scale generation (x3)** – number of synthetic images is three times the real dataset size (e.g., 100 real + 300 synthetic)

Synthetic Data Filtering. Various filtering strategies are applied to each synthetic dataset (see Section 3.2):

- Global filtering with 30, 40, 50, 60 and 70 % removal thresholds;
- Per-class filtering with 30, 40, 50, 60 and 70 % removal thresholds.

YOLO Detector. YOLOv11s architecture is used as the object detector. Optimal hyperparameters are tuned for each real dataset size and remain unchanged when synthetic data (both filtered and unfiltered) are added: Batch size: from 2 (for 100 images) to 32 (for 8,000–12,000 images). Number of epochs: from 500 (for 100 images) to 150 (for 12,000 images). Learning rate: from 0.000005 (for 100 images) to 0.012 (for 12,000 images)

We report standard COCO-style mAP@0.5 and per-class F1 at IoU = 0.5. For generation quality evaluation, FID based methods are used (see Section 3.2).

Synthetic Data Examples. Fig. 1 shows representative real images for each defect class. Fig. 2 presents corresponding synthetic images generated by our diffusion model. The model successfully reproduces wood texture and maintains bounding box alignment.

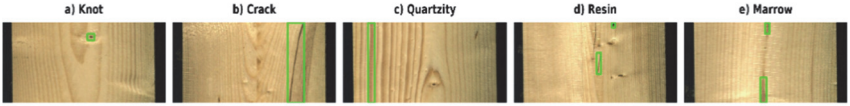


Fig. 1. Real wood defect examples for each class: a) Knot, b) Crack, c) Quartzity, d) Resin, e) Marrow

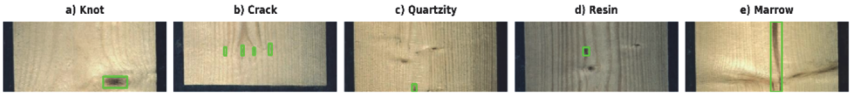


Fig. 2. Synthetic images generated by the diffusion model for the same five classes. The model preserves both visual appearance and bounding box alignment

Experimental caveats. All results correspond to a single training run per configuration; differences below ~ 1 p.p. mAP should be interpreted with caution. YOLOv11s built-in augmentations (mosaic, mixup, HSV jitter, random flips) were active in all experiments, including the Real-only baseline. Direct comparison with external methods (FLORA [11], InstaGen [6], MosaicFusion [9], SGGA [21]) was not performed because these methods target different generation paradigms and are not directly applicable to our bounding-box-conditioned industrial setting. We position our contribution as a systematic study of filtering strategies rather than a claim of state-of-the-art performance.

3.2. Baseline Experiments (Real vs Mix)

Baseline experiments aim to evaluate the impact of synthetic data on detection quality without filtering. Two approaches are compared: training on real data only (Real) and training on real data augmented with synthetic data in a 1:1 ratio (Mix). This establishes a reference point for subsequent filtering effectiveness evaluation.

Table 1

Comparison of Real vs Mix 1:1 (F1, mAP, %)

Samples	Real F1	Real mAP	Mix F1	Mix mAP
100	**76.87**	33.47	76.79-0.08	**34.24+0.77**
500	**81.69**	**40.48**	81.26-0.43	39.52-0.96
1000	**83.90**	40.80	83.60-0.30	**41.65+0.85**
2000	**85.53**	44.38	85.20-0.33	**44.86+0.48**
4000	86.37	45.56	**86.98+0.61**	**47.57+2.01**
8000	87.58	47.94	**88.05+0.47**	**49.99+2.05**
12000	87.77	49.07	**88.40+0.63**	**49.66+0.59**
Average Diff			**+0.08**	**+0.83**

Key findings. Mix 1:1 outperforms Real on 6/7 sizes according to mAP (exception: 500 images, -0.96 %). Largest gains at 4,000 (+2.01 %) and 8,000 (+2.05 %).

3.3. Filtering Experiments (1:1 Generation)

We evaluate whether iFID-based filtering improves upon Mix 1:1 and compare global vs. per-class strategies across all dataset sizes.

Table 2

Global vs Per-Class Filtering (F1, %) – 30, 50 % Removal

Samples	Real	Mix	Retain 70% (global)	Retain 50 % (global)	Retain 70 % (per-class)	Retain 50 % (per-class)
100	76.87	76.79-0.08	77.92+1.05	78.06+1.19	**78.80+1.93**	77.72+0.85
500	81.69	81.26-0.43	**82.25+0.56**	82.19+0.50	80.87-0.82	80.77-0.92
1000	83.90	83.60-0.30	84.15+0.25	83.87-0.03	**84.21+0.31**	83.85-0.05
2000	85.53	85.20-0.33	85.36-0.17	84.98-0.55	85.02-0.51	**85.72+0.19**
4000	86.37	86.98+0.61	86.91+0.54	86.42+0.05	86.59+0.22	**87.03+0.66**
8000	87.58	**88.05+0.47**	87.79+0.21	87.84+0.26	87.82+0.24	87.32-0.26
12000	87.77	**88.40+0.63**	88.38+0.61	88.32+0.55	88.37+0.60	88.10+0.33
Average Diff		+0.08	**+0.44**	+0.28	+0.28	+0.11

Table 3

Global vs Per-Class Filtering (mAP, %) – 30, 50 % Removal

Samples	Real	Mix	Retain 70 % (global)	Retain 50 % (global)	Retain 70 % (per-class)	Retain 50 % (per-class)
100	33.47	34.24+0.77	35.15+1.68	34.92+1.45	**36.00+2.53**	33.93+0.46
500	40.48	39.52-0.96	40.10-0.38	40.01-0.47	**40.24-0.24**	38.88-1.60
1000	40.80	41.65+0.85	40.71-0.09	40.77-0.03	**42.26+1.46**	41.76+0.96
2000	44.38	**44.86+0.48**	44.11-0.27	43.16-1.22	43.10-1.28	44.07-0.31
4000	45.56	47.57+2.01	**48.28+2.72**	46.18+0.62	46.80+1.24	47.19+1.63
8000	47.94	**49.99+2.05**	49.12+1.18	49.11+1.17	49.06+1.12	48.76+0.82
12000	49.07	49.66+0.59	49.84+0.77	50.60+1.53	**50.73+1.66**	49.67+0.60
Average Diff		+0.83	+0.80	+0.44	**+0.93**	+0.37

Key findings. Per-class filtering at 30 % removal works best on small (100–1,000) and large (12,000) datasets. Global filtering at 30% removal excels at 4,000 images (48.28 % mAP). Aggressive filtering (50% removal) is generally harmful except at 12,000.

3.4. Oversampling Experiments

We evaluate whether targeted oversampling of rare classes (Quartzity, Marrow) improves their detection beyond what Mix 1:1 achieves.

Table 4

Effect of Oversampling on Quartzity Detection (F1, %)

Samples	Real	Mix	Oversampling
100	6.42	14.81+8.39	**19.84+13.42**
500	31.34	**42.35+11.01**	35.82+4.48
1000	42.20	34.63-7.57	**38.08-4.12**
2000	44.31	**51.65+7.34**	47.91+3.60
4000	48.88	**53.05+4.17**	51.98+3.10
8000	50.86	**52.94+2.08**	51.59+0.73
12000	54.50	**57.14+2.64**	56.40+1.90
Average Diff		**+4.01**	+3.30

Table 5

Effect of Oversampling on Quartzity Detection (mAP, %)

Samples	Real	Mix	Oversampling
100	3.22	9.86+6.64	**13.46+10.24**
500	20.54	17.82-2.72	**18.40-2.14**
1000	23.95	22.39-1.56	**23.93-0.02**
2000	24.76	**31.43+6.67**	29.05+4.29
4000	27.53	**36.62+9.09**	33.48+5.95
8000	36.00	**37.89+1.89**	37.18+1.18
12000	39.49	39.04-0.45	**39.35-0.14**
Average Diff		**+2.79**	+2.77

Key findings. Oversampling improves Quartzity detection on small datasets: +10.2 p.p. mAP at 100 images (3.2 % → 13.5 %). Benefit diminishes on larger datasets (4,000–8,000), where Mix 1:1 performs better.

3.5. Triple-Scale Generation Experiments (x3)

These experiments investigate whether generating a larger volume of synthetic data (3× the real dataset size) followed by aggressive filtering can outperform standard Mix 1:1 generation. The hypothesis is that by generating more data, we can afford to be more selective, retaining only the highest quality samples while still maintaining sufficient synthetic volume for effective training.

Table 6

Triple-Scale Generation with Different Filtering Thresholds (F1, %)

Samples	Real	Mix	×3, Retain 30 % (global)	×3, Retain 100 % (no filter)	×3, Retain 50 % (per-class)	×3, Retain 70 % (per-class)
100	76.87	76.79-0.08	**79.20+2.33**	79.15+2.28	76.88+0.01	77.73+0.86
500	81.69	81.26-0.43	**83.32+1.63**	80.57-1.12	82.40+0.71	80.97-0.72
1000	83.90	83.60-0.30	83.11-0.79	83.77-0.13	83.53-0.37	**84.11+0.21**
2000	85.53	85.20-0.33	85.21-0.32	**86.38+0.85**	85.83+0.30	85.50-0.03
4000	86.37	86.98+0.61	87.14+0.77	86.93+0.56	**87.37+1.00**	87.27+0.90
8000	87.58	**88.05+0.47**	87.70+0.12	87.27-0.31	87.61+0.03	87.60+0.02
12000	87.77	88.40+0.63	88.26+0.49	88.31+0.54	**88.58+0.81**	88.22+0.45
Average Diff		+0.08	**+0.60**	+0.38	+0.36	+0.24

Table 7

Triple-Scale Generation with Different Filtering Thresholds (mAP, %)

Samp-les	Real	Mix	×3, Retain 30 % (globa)	×3, Retain 50 % (global)	×3, Retain 70 % (global)	×3, Retain 100 % (no filter)	×3, Retain 40 % (per-class)
100	33.47	34.24+0.77	**36.87+3.40**	33.93+0.46	34.67+1.20	34.56+1.09	35.17+1.70
500	40.48	39.52-0.96	40.34-0.14	39.52-0.96	**40.84+0.36**	40.10-0.38	40.30-0.18
1000	40.80	41.65+0.85	41.74+0.94	**42.67+1.87**	42.44+1.64	42.04+1.24	41.43+0.63
2000	44.38	44.86+0.48	44.25-0.13	45.20+0.82	45.55+1.17	**46.89+2.51**	43.33-1.05
4000	45.56	47.57+2.01	46.97+1.41	**48.66+3.10**	47.59+2.03	48.52+2.96	47.17+1.61
8000	47.94	**49.99+2.05**	49.04+1.10	48.82+0.88	48.94+1.00	49.30+1.36	48.72+0.78
12000	49.07	49.66+0.59	50.00+0.93	50.62+1.55	49.72+0.65	49.89+0.82	**50.71+1.64**
Average Diff		+0.83	+1.07	+1.10	+1.15	**+1.37**	+0.73

We acknowledge that the ×3 configuration provides a larger total number of training samples compared to Mix 1:1. Therefore, the observed improvements cannot be unambiguously attributed solely to filtering quality; increased data volume may also contribute. However, we note that in the most aggressive filtering setting (retain 30 %, i.e., 70 % removal), the effective synthetic volume in the ×3 setting is 0.9× the real set size–comparable to Mix 1:1–yet performance still exceeds Mix 1:1 on several dataset sizes (e.g., 36.87 % vs. 34.24 % mAP at 100 images). This suggests that selection quality does contribute beyond mere volume increase. Nevertheless, we frame the ×3 results as an upper-bound strategy combining volume and quality, rather than a controlled ablation of filtering alone.

Tables 6 and 7 present only the best-performing filtering thresholds per dataset size. For each configuration, we show the threshold that achieved the highest mAP–e.g., 30 % removal for 100 images, 50–70 % removal for 1,000–4,000 images. Thresholds that did not yield the best result are omitted for clarity.

Key findings. Triple-scale generation outperforms 1:1 methods on datasets up to 4,000 images. Optimal filtering threshold varies: 70 % retention for 100 images, 50–60 % retention for 1,000–4,000 images. The highest observed mAP values reach 48.66 % at 4,000 images and 50.71 % at 12,000 images.

4. Conclusion and Limitations

4.1. Limitations and Future Work

Several limitations of this study should be noted. First, all experiments were conducted with a single run per configuration; statistical significance of the observed differences was not assessed. Second, the iFID metric used for filtering is a per-image adaptation of the distribution-level iFID and may not fully capture perceptual quality. Third, we did not compare our approach with alternative filtering metrics (CLIP-score, LPIPS, precision/recall) or with external generation methods (FLORA, InstaGen, Copy-Paste augmentation). Fourth, the wood defect dataset is proprietary, limiting reproducibility. Future work includes multi-seed experiments with statistical testing, exploration of alternative filtering metrics, comparison with Copy-Paste and other simple augmentation baselines, and application of the proposed pipeline to other industrial inspection domains.

4.2. Conclusion

We conducted a systematic study of iFID-based filtering for synthetic data generated by a bounding box-guided diffusion model [7] for wood defect detection across seven training set sizes (100 to 12,000 real images). Our primary objective was to enhance wood defect detection under data scarcity by augmenting real training data with synthetic images. The core research question was how different FID-based filtering strategies affect downstream detector quality. We compared global vs. per-class filtering, oversampling for rare classes (Quartzity, Marrow), and triple-scale generation (3× synthetic volume) with aggressive filtering.

Our findings show that the optimal filtering strategy depends on dataset size. Global filtering performs better on medium datasets (2,000–8,000 images), while per-class filtering excels on small (100–1,000) and large (12,000) datasets. For 1:1 generation, mild filtering (30% removal) is beneficial; removing 50 % or more typically harms performance due to diversity loss.

Oversampling of rare classes improves their representation from 2–3 to 7–8 %, yielding significant gains for Quartzity detection: +10.2 p.p. mAP on 100 images (3.2 % → 13.5 %) and +4.3 p.p. on 2,000 images. Triple-scale generation with optimal filtering yields the highest observed mAP values: 48.66 % on 4,000 images and 50.71 % on 12,000 images.

Acknowledgments

The author would like to thank Vadim Gorbachev for his scientific supervision, valuable discussions, and for providing the computational resources and industrial dataset access necessary to conduct this extensive experimental study.

References

1. Urbonavičius V., et al. Detection of wood defects using deep learning // Wood Science and Technology, 2022.
2. Wang Y., et al. Wood surface defect detection based on improved YOLOv5 // Forests, 13(8), 2022.
3. Li Y., et al. A review of machine vision for wood defect detection // BioResources, 18(2), 2023.
4. Yang M., Sheng E.L., Kean Y.W., Deng S. and Tiong S.K. (2025). A survey of data augmentation techniques for traffic visual elements. Sensors, 25(21), 6672.
5. Plas K., Lin J. and Zhan, J. (2025). Unified fidelity metric for synthetic imagery. SSRN Electronic Journal.
6. Feng C., Zhong Y., Jie Z., Chu X., Ren H., We X. and Ma L. (2024). InstaGen: Enhancing object detection by training on synthetic dataset. In Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (p. 12345–12354).
7. Caruso E., Simoni A. and Pelosin, F. (2025). Bounding box-guided diffusion for synthesizing industrial images and segmentation maps. In Synthetic Data for Computer Vision Workshop, CVPR 2025.
8. Nie S., Liu Z., Li H., Wu Y. and Zhao G. (2024). Diverse generation while maintaining semantic coordination: A diffusion-based data augmentation method for object detection. arXiv preprint arXiv:2408.02891.
9. Xie J., Li W., Li X., Liu Z., Ong Y.S. and Loy C.C. (2024). MosaicFusion: Diffusion models as data augmenters for large vocabulary instance segmentation. International Journal of Computer Vision (IJCV).
10. Heusel M., Ramsauer H., Unterthiner T., Nessler B. and Hochreiter S. (2017). GANs trained by a two time-scale update rule converge to a local nash equilibrium. Advances in Neural Information Processing Systems, 30.
11. Patricio A. (2025). FLORA: Efficient synthetic data generation for object detection in low-data regimes via finetuning Flux LoRA. arXiv preprint arXiv:2508.21712.
12. Ahmed T., Kumar A., Casado C.A., Zhang A., Hänninen T., Loven L., Bordallo López M. and Tarkoma S. (2025). Exponentially weighted instance-aware repeat factor sampling for long-tailed object detection model training in unmanned aerial vehicles surveillance scenarios. In 2025 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems (IROS), IEEE.
13. Liu Y., et al. (2025). Diverse instance generation via diffusion models for enhanced few-shot object detection in remote sensing images. IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters, 22, 1–5.

14. Dhariwal P. and Nichol A. (2021). Diffusion models beat GANs on image synthesis. Advances in Neural Information Processing Systems, 34, 8780–8794.

15. Tang Datao et al. (2025). AeroGen: Enhancing remote sensing object detection with diffusion-driven data generation. Proceedings of the Computer Vision and Pattern Recognition Conference.

16. Chen Ka, et al. (2024). GeoDiffusion: Text-prompted geometric control for object detection data generation. International Conference on Learning Representations. Vol. 2024.

17. Zhu J., et al. (2024). ODGEN: Domain-specific object detection data generation with diffusion models. arXiv preprint arXiv:2405.15199.

18. Ghiasi Golnaz et al. "Simple copy-paste is a strong data augmentation method for instance segmentation." Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2021.

19. Chawla N.V., Bowyer K.W., Hall L.O. and Kegelmeyer W.P. (2002). SMOTE: Synthetic minority over-sampling technique. Journal of Artificial Intelligence Research, 16, 321-357.

20. Wang W., Wang S., Fan W., Liu Z. and Tang J. (2020). Global-and-local aware data generation for the class imbalance problem. In Proceedings of the 2020 SIAM International Conference on Data Mining (SDM), pp. 307-315.

21. Jeong D., Heo D., Ahn S., Cho, J. and Choi S. (2026). SGGA: Semantic-guided generative augmentation for object detection in highly imbalanced disaster imagery. International Journal of Control, Automation and Systems.

22. Jayasumana Sadeep, et al. (2024). Rethinking FID: Towards a better evaluation metric for image generation. Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition.

Секция

Интерфейс мозг-компьютер. Нейротехнологии

П.Д. ШАПОШНИКОВ, И.В. ЩЕРБАНЬ
Научно-исследовательский технологический центр нейротехнологий,
Южный федеральный университет
pavsh@sfedu.ru

МЕТОД ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ЭЭГ-СИГНАЛОВ С ПОМОЩЬЮ СЕТИ РАДИАЛЬНЫХ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ ИДЕОМОТОРНЫХ ПАТТЕРНОВ В МОБИЛЬНЫХ ИНТЕРФЕЙСАХ МОЗГ-КОМПЬЮТЕР*

В работе рассматривается метод интерполяции сигналов ЭЭГ с помощью нейронной сети с радиальными базисными функциями (РБФ) для частичного восстановления пространственно-временного управляющего паттерна. Исследование проводилось на открытом датасете содержащем ЭЭГ-паттерны мысленных движений. Восстанавливались информативные каналы C3 и C4 по сигналам с 11 электродов мобильной конфигурации. Качество полученных сигналов оценивалось при помощи нейросетевой архитектуры EEGNet. Показано, что реконструкция сигналов в значимых отведениях на основе РБФ-интерполяции позволяет повысить точность распознавания паттернов при сокращении числа ЭЭГ-каналов.

Ключевые слова: *интерфейс мозг-компьютер, ЭЭГ, радиально-базисные функции, пространственная интерполяция, моторные образы, EEGNet, мобильные нейроинтерфейсы.*

Введение

Интерфейсы «мозг–компьютер» (ИМК) представляют собой класс нейрокоммуникационных систем, обеспечивающих прямое взаимодействие между центральной нервной системой человека и внешними техническими устройствами без участия периферических мышц и нервов [1, 2].

* Работа выполнена при поддержке Программы стратегического и академического лидерства Южного федерального университета Приоритет-2030.

В настоящее время ИМК находят широкое применение в медицинской реабилитации пациентов с тяжёлыми моторными и речевыми нарушениями [3, 4], в робототехнике для управления антропоморфными манипуляторами и экзоскелетными системами [5], а также в когнитивных исследованиях для изучения механизмов принятия решений, устойчивого внимания и нейропластичности [6]. Функционирование большинства неинвазивных ИМК основано на детекции и классификации частотно-пространственных паттернов электроэнцефалограммы (ЭЭГ), ассоциированных с определёнными мысленными командами пользователя, включая модуляцию сенсомоторных ритмов (событийно-связанная десинхронизация и синхронизация), генерацию событийно-связанных потенциалов (ССП) и изменение уровня когнитивной нагрузки [4, 7, 8].

Современные стационарные системы регистрации ЭЭГ высокого разрешения, включающие от 128 до 256 и более отведений, обеспечивают детальное картирование корковой электрической активности и позволяют идентифицировать пространственно-частотные паттерны с точностью, достаточной для решения прикладных задач нейроуправления [9, 10]. Применение многоканальных конфигураций позволяет эффективно выделять локальные особенности корковой активности, критически важные для разграничения близких по топологии мысленных состояний [7, 11]. Вместе с тем мобильные ЭЭГ-гарнитуры, оснащённые ограниченным числом электродов (от 2 до 10), решают задачу доступности, портативности и удобства длительного использования, однако радикальное сокращение числа регистрирующих каналов существенно обедняет пространственную картину сигнала и приводит к статистически значимому снижению точности классификации мысленных команд [10, 12].

Достижение необходимого баланса между функциональной полнотой ИМК и технологической доступностью, может быть обеспечено на основе перехода к мобильным аппаратным платформам в сочетании с алгоритмическими методами компенсации недостающей пространственной информации. В частности, для мониторинга уровня бодрствования и устойчивого внимания сигналы ЭЭГ преимущественно регистрируются в лобных (Fp1, Fp2, Fz) и затылочных (O1, O2, Oz) отведениях, что обусловлено вовлечённостью префронтальной коры и зрительных областей в процессы поддержания когнитивного контроля [6, 13]. Для распознавания образов мысленных движений (motor imagery) информативными являются центральные (C3, C4, Cz), лобные (FC1, FC2) и височные (T7, T8) отведения, отражающие модуляцию мю- (8–13 Гц) и бета-ритмов (13–30 Гц) в сенсомоторной коре [4, 7, 11]. Для детекции событийно-связанных потенциалов, в частности компонента P300,

используемого в орфографических ИМК, ключевыми являются центральные (Cz, CPz) и лобно-теменные (Fz, Pz) отведения [8, 14].

Паттерны мысленного произнесения слов (imagined speech) индуцируют пространственно распределённую корковую активность, охватывающую лобные (F3, F4, Fz, FCz), центральные (C3, C4) и височно-теменные (T5/T7, P7, CP5) области [15, 16]. Указанная топология отражает одновременное вовлечение зон Брока и Вернике, дополнительной моторной области и премоторной коры в процесс внутреннего порождения речи [3, 16]. Существенное уменьшение количества каналов ЭЭГ приводит к деградации измерительной системы. [7, 11]. Использование любой мобильной ЭЭГ-гарнитуры с ограниченным набором электродов принципиально не охватывает перечисленных пространственных областей, что ведёт к снижению информативности измерительного тракта и, как следствие, к ухудшению точности, временной стабильности и общей надёжности функционирования ИМК [10, 12].

Для достижения требуемых показателей качества классификации в ИМК на основе мобильных ЭЭГ-гарнитур в настоящей работе разработан метод восстановления частотно-временных паттернов биоэлектрической активности головного мозга посредством пространственной интерполяции с использованием нейронных сетей на основе радиальных базисных функций (РБФ). Математический аппарат РБФ-аппроксимации обеспечивает высокую точность реконструкции многомерных пространственных полей при умеренной вычислительной сложности и успешно применяется в задачах анализа и восстановления распределённых биосигналов [9].

Целью работы является экспериментальная оценка метода повышения точности распознавания паттернов мысленных движений в мобильных интерфейсах «мозг–компьютер» за счёт пространственной интерполяции сигналов с ограниченного набора электродов (11 отведений) на нейронной сети с радиальными базисными функциями. Предлагаемый подход позволяет восстанавливать биоэлектрическую активность в отсутствующих отведениях относительно стандартной стационарной схемы «10–20», тем самым приближая классификационную способность мобильной гарнитуры к уровню многоканальных лабораторных систем регистрации.

Исходные данные

Для всех расчетов в работе был использован открытый валидированный датасет BCI Competition IV Dataset 2a, содержащий ЭЭГ-записи 9 испытуемых при выполнении 4 классов моторных образов: воображение движе-

ний левой руки, правой руки, ног и языка [17]. Регистрация ЭЭГ проводилась по международной системе 10–20 с использованием 22 каналов. Для моделирования мобильного интерфейса использовались 11 отведений: Fz, F7, F8, T3, Cz, T4, P7, P8, P3, P4, Oz. Каждый паттерн представляет собой 4 секундный фрагмент ЭЭГ-сигнала с меткой, обозначающей вид мысленного движения. Датасет разделен на две сессии – обучающую и тестовую.

Координаты отведений были получены из библиотеки MNE для Python, как проекции пространственных координат на плоскость xOy с центром в отведении Cz, и масштабированные в квадрат 100x100 (рис 1).

Целевые каналы C3 и C4, наиболее информативные для латерализованных моторных паттернов, исключались из входного набора и восстанавливались при помощи сети радиальных базисных функций.

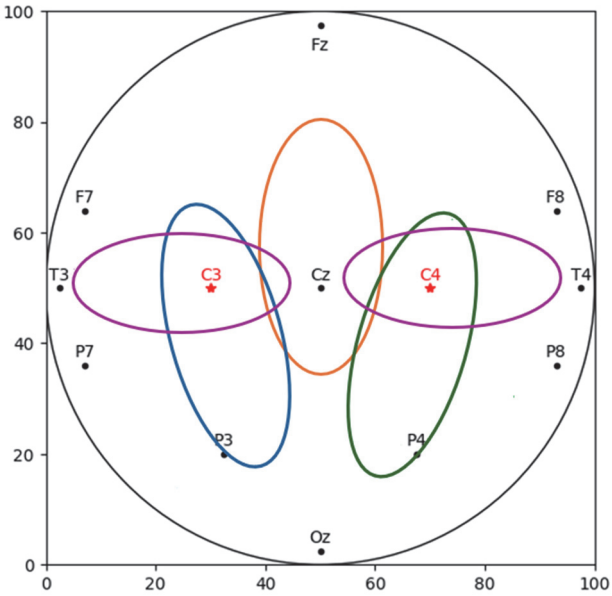


Рис. 1. Монтаж электродов и области возникновения паттернов ЭЭГ, связанных с мысленными движениями и координатное представление используемых кана. Синий – правая рука, зеленый – левая рука, оранжевый – ноги, пурпурный – язык

Архитектура нейронной РБФ-сети

Сеть радиальных базисных функций (РБФ-сеть) представляет собой искусственную нейронную сеть с архитектурой прямого распространения сигнала. Её ключевой особенностью является наличие промежуточного (скрытого) слоя, состоящего из радиально симметричных нейронов. Каждый нейрон данного слоя выполняет нелинейное преобразование входных данных, вычисляя расстояние от текущего входного вектора до фиксированной точки в пространстве признаков − так называемого центра радиальной функции. Подобная топология позволяет эффективно аппроксимировать сложные многомерные зависимости и решать задачи пространственной интерполяции.

Радиальная базисная функция представляет собой двумерную функцию Гаусса, которая зависит только от расстояния до центра (1):

$$\varphi(x, y, c) = \exp\left(-0,5\left(\frac{(x-c_x)^2}{\sigma_x^2} + \frac{(y-c_y)^2}{\sigma_y^2}\right)\right), \quad (1)$$

где c − координаты электрода в пространстве головы, σ − параметр ширины, управляющий локальностью отклика.

В качестве центров радиальных базисных функций скрытого слоя выбраны пространственные координаты 11 референсных (обучающих) электродов. Инициализация вектора весов выходного слоя выполняется случайным образом, что обеспечивает начальный поиск оптимальных параметров модели. В качестве целевых значений (функции отклика) на этапе обучения используются мгновенные значения анализируемых сигналов.

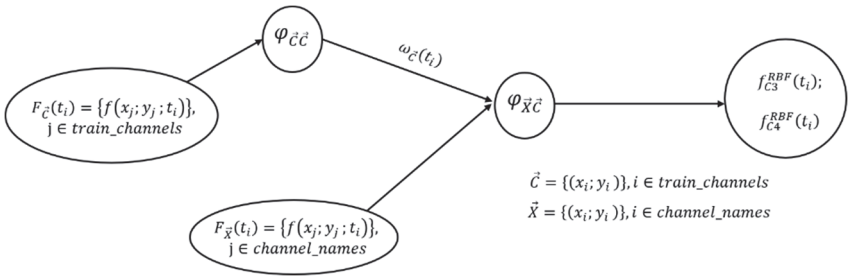


Рис. 2. Структурная схема сети РБФ

Восстановление сигналов осуществляется за счет интерполяции сигналов в интересующих координатах отведений при помощи РБФ сети (рис.2). Каналы для обучения сети (train_channels) формируют входной слой. Затем происходит поиск оптимальных весов ω_i через процедуру обучения (2).

$$\omega_c^{I+1} = \omega_c^I + \theta * \left(F\left(t_c\right) - \sum_{i=1}^{11} \omega_i^I \varphi_{i,c} \right). \qquad (2)$$

Критерием завершения процесса обучения является достижение моделью состояния, при котором её выходные значения с высокой точностью (порядка 10^{-11}) соответствуют исходным обучающим сигналам. Такая сверхвысокая точность интерполяции свидетельствует об адекватности выбранной архитектуры и успешном формировании пространственной модели сигнала.

На этапе восстановления полученный в результате обучения вектор весовых коэффициентов транслируется на расширенную топологию сети. Данная расширенная сеть синтезируется для полного набора пространственных координат всех рассматриваемых целевых отведений (channel_names). Применение обученной весовой матрицы к активациям расширенного слоя позволяет сформировать итоговый вектор, содержащий восстановленные сигналы для всей совокупности анализируемых отведений. Компоненты вектора, соответствующие координатам каналов C3 и C4 являются предсказанными РБФ-сетью значениями сигнала.

Результаты

Для оценки качества интерполяции сигнала для каждого класса ментальных движений было рассчитано евклидово расстояние между восстановленным и исходным сигналом для каждой эпохи набора данных (рис. 3). Перед вычислением метрики данные подвергались процедуре нормализации по минимуму и максимуму, выполняемой независимо для каждой эпохи k (3):

$$x_k^{norm}(t) = \frac{x_k(t) - \min\limits_k(x)}{\max\limits_k(x) - \min\limits_k(x)}. \qquad (3)$$

В качестве критерия приемлемого качества реконструкции было установлено требование, согласно которому расстояние между исходным и восстановленным сигналами должно быть на два-три порядка меньше характерной длины сигнала (табл. 1).

Таблица 1

Средние значения длины нормализованных сигналов

	Исходный сигнал	Восстановленный сигнал
C3	16,66 ± 1,62	16,42 ± 1,56
C4	16,70 ± 1,57	16.45 ± 1,55

Сконфигурированная нейронная сеть восстановила 2 симметричных канала C3 и C4 с сопоставимым качеством. Для обоих отведений среднее значение метрики d по совокупности эпох всех классов ментальных движений имеет порядок 10^{-2}.

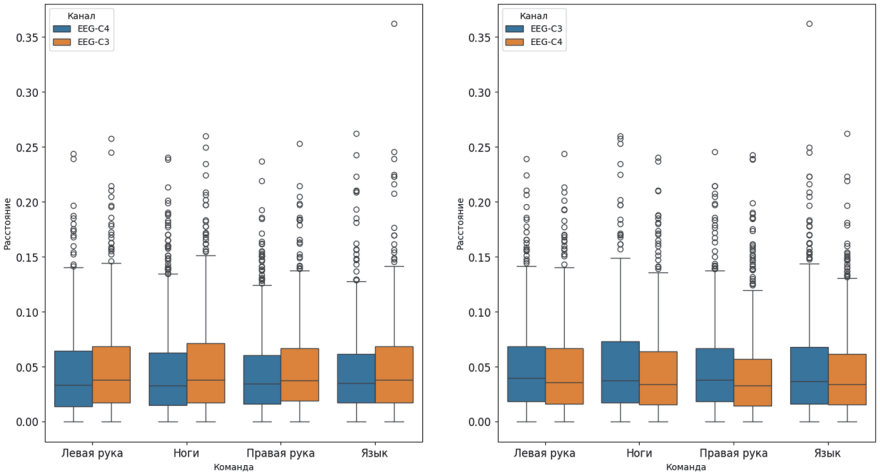


Рис 3. Оценка расстояния между исходными и восстановленными эпохами ЭЭГ для обучающей и тестовой сессии

Полученные результаты (рис. 3) подтверждают, что предложенный метод РБФ-интерполяции обеспечивает пространственное восстановление сигналов с точностью, достаточной для сохранения информативных частотно-пространственных паттернов, необходимых для классификации мысленных движений.

Классификация

Валидация результатов восстановления сигналов проводилась при помощи специализированной нейросетевой архитектуры EEGNet 8.2, позволяющей использовать исходные временные ряды в классификации ЭЭГ-паттернов. Основным критерием оценки являлась результирующая точность нейросетевой модели после 5 fold кроссвалидации.

Таблица 2

Средние значения точности EEGNet после кроссвалидации

	Весь датасет	Выбранные каналы	Каналы для обучения	Модель сигнала РБФ
Точность, %	77,21 ± 2,70	74,11 ± 2,89	71,68 ± 2,37	72,27 ± 2,58

Проводилось 4 серии обучения сети на разных комбинациях каналов: все каналы в датасете (1), выбранные каналы (2), каналы для обучения (3) и РБФ модель сигнала (4). Средние точности классификации (табл. 2) демонстрируют частичное восстановление информативности каналов C3 и C4.

Использование всех доступных отведений для стандартных настроек нейросети показало совпадающую с литературными данными точность [18], которая использовалась как максимальная оценка. Дальнейшие тесты включали 11 исходных канала и 2 рассматриваемых (C3 и C4), рис. 4.

За счет ключевой роли отведений C3 и C4 в феномене идеомоторных актов включение их в обучение нейросети добавляет 3 % точности относительно ЭЭГ без них (рис.4. В) и существенно меняет распределение правильно распознанных классов. Применение интерполированных сигналов C3 и C4 сохраняет характер распределения по классам и повышает точность модели на 1 % (рис. 4. Г).

Объясняется это тем, что интерполяция восстанавливает только те особенности сигнала, которые фиксируют и соседние отведения. Тем самым локальная информация восстановленных отведений частично теряется.

Сохранение характера распределения по классам также связано с природой интерполируемых сигналов как преобразования соседних отведений.

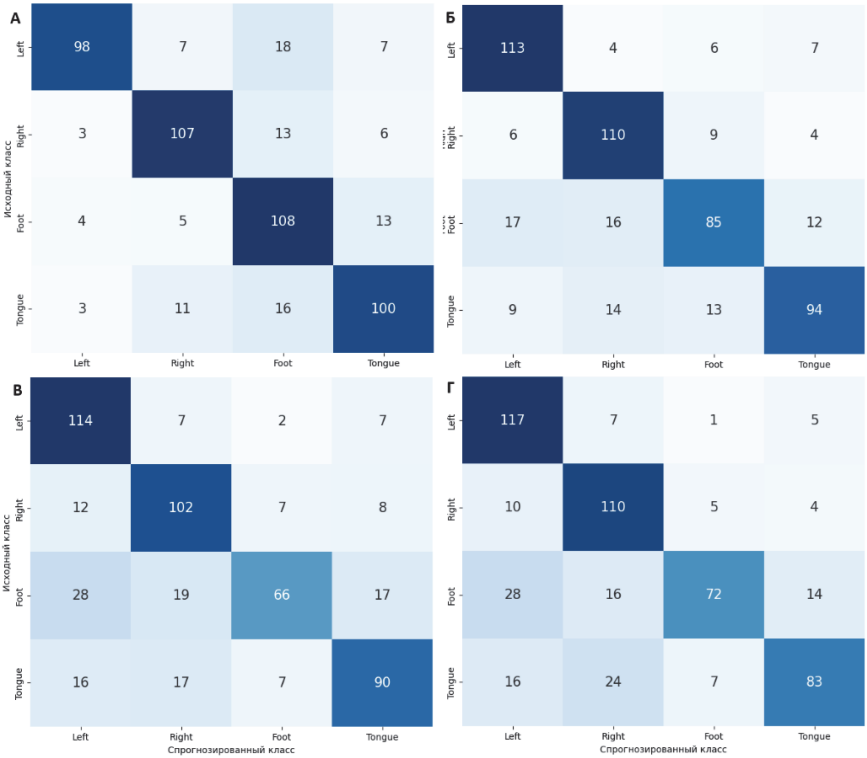


Рис. 4. Матрицы ошибок и точность классификации
по экспериментальным сериям. А – весь датасет, Б – 13 выбранные каналы,
В – каналы для обучения, Г – РБФ модель сигнала

Выводы

Пространственная интерполяция ЭЭГ на основе радиально-базисных функций позволяет восстанавливать в мобильных интерфейсах «мозг–компьютер» сигналы отведений, не предусмотренных конструкцией гарнитуры, что расширяет функциональные возможности таких систем без изменения аппаратной части. Эксперименты на датасете BCI Competition IV Dataset 2a показали, что восстановление информативных для задач мысленного управления движениями каналов C3 и C4 позволяет повысить точ-

ность классификации моторных образов. Перспективы дальнейших исследований включают адаптацию предложенного метода к работе в онлайн-режиме.

Список литературы

1. Makin J.G., Moses D.A., Chang E.F. Machine translation of cortical activity to text with an encoder–decoder framework // Nature Neuroscience. 2020. V. 23. №. 4. P. 574–582.

2. Willett F.R., Avansino D.T., Hochberg L.R., Henderson J.M., Shenoy K.V. High-performance brain-to-text communication via handwriting // Nature. 2021. V. 593. № 7858. P. 249–254.

3. Bruurmijn, L. C. M., Raemaekers, M., Branco, M. P., Vansteensel, M. J., Ramsey, N. F. Decoding attempted phantom hand movements from ipsilateral sensorimotor areas after amputation. // Journal of Neural Engineering. 2021. V. 18. № 5. P. 056037.

4. Lotte F., Bougrain L., Cichocki A., Clerc M., Congedo M., Rakotomamonjy A., Yger F. A review of classification algorithms for EEG-based brain–computer interfaces: a 10 year update // Journal of Neural Engineering. 2018. V. 15. №. 3. P. 031005.

5. Roy Y., Banville H., Albuquerque I., Gramfort A., Falk T.H., Faubert J. Deep learning-based electroencephalography applications: a systematic review // Journal of Neural Engineering. 2019. V. 16. №. 5. P. 051001.

6. Di Flumeri G., Aricò P., Borghini G., Scannella S., Camilleri R., Pozzi S., Babiloni F. EEG-based cognitive control behaviour assessment: an ecological study with professional air traffic controllers // Scientific Reports. 2018. V. 8. №. 1. P. 16596.

7. Padfield N., Zabalza J., Zhao H., Masero V., Ren J. EEG-based brain-computer interfaces using motor-imagery: techniques and challenges // Sensors. 2019. V. 19. №. 6. P 1423.

8. Jin J., Wang H., Daly I., Zhao X., Li S., Cichocki A. A Fully Unsupervised Online Classification Algorithm for Event-Related Potential based Brain-Computer Interfaces // IEEE Transactions on Biomedical Engineering. 2026.

9. Marino M., Mantini D. Human brain imaging with high-density electroencephalography: Techniques and applications // The Journal of Physiology. 2026. V. 604. № 2. P. 783–812.

10. Krigolson O.E., Williams C.C., Norton A., Hassall C.D., Colino F.L. Choosing MUSE: validation of a low-cost, portable EEG system for ERP research // Frontiers in Neuroscience. 2017. V. 11. P. 109.

11. Su Z., Gan K. B., Sim K. S. Decoding upper-limb Motor Imagery from EEG signals: a systematic review of methods and applications. //Annals of biomedical engineering. 2026. P. 1–23.

12. Xu C., Song Y., Zheng Q., Wang Q., Heng, P.A. Unsupervised multi-source domain adaptation via contrastive learning for EEG classification. // Expert Systems with Applications. 2025. V. 261. P. 125452.

13. Aricò P., Borghini G., Di Flumeri G., Colosimo A., Bonelli S., Golfetti A., Bonetti G., Pozzi S., Mangiarotti R., Bezzi M., Babiloni F. Adaptive automation triggered

by EEG-based mental state: effects on human performance // Frontiers in Human Neuroscience. 2016. V. 10. P. 539.

14. Turay T. A novel 3D region-based speller paradigm for BCI systems // Scientific Reports. 2026.

15. Torres-García A.A., Reyes-García C.A., Villaseñor-Pineda L. A survey on EEG-based imagined speech classification //Biosignal Processing and Classification Using Computational Learning and Intelligence. 2022. P. 251–270.

16. Anumanchipalli G.K., Chartier J., Chang E.F. Speech synthesis from neural decoding of spoken sentences // Nature. 2019. V. 568. №. 7750. P. 49–54.

17. Tangermann M., Müller K.-R., Aertsen A., Birbaumer N., Braun C., Brunner C., Leeb R., Mehring C., Miller K.J., Müller-Putz G.R., Nolte G., Pfurtscheller G., Preissl H., Schalk G., Schlögl A., Vidaurre C., Waldert S., Blankertz B. Review of the BCI Competition IV // Frontiers in Neuroscience. 2012. V. 6. № 55.

18. Lawhern V.J., Solon A.J., Waytowich N.R., Gordon S.M., Hung C.P., Lance B.J. EEGNet: a compact convolutional neural network for EEG-based brain–computer interfaces // Journal of neural engineering. 2018. V. 15. № 5. P. 05601.

А.В. РЫБАЛКО[1,2], Н.А. БАБИЧ[1], А.Л. ФРАДКОВ[1,2]
[1]Институт проблем машиноведения РАН
[2]Санкт-Петербургский государственный университет
alf@ipme.ru

КИБЕРНЕТИЧЕСКАЯ НЕЙРОБИОЛОГИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ СТЕНД ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕЙРОИНТЕРФЕЙСОВ

Работа посвящена новой научной области, кибернетической нейробиологии (нейронауке) и ее применениям. Кибернетическая нейронаука является разделом вычислительной нейронауки, её предметом является изучение нервных систем, в частности мозга человека, методами кибернетики. Дан краткий обзор задач и методов этой области. Описан нейроинтерфейсный экспериментальный стенд для управления движением, разработанный в Институте проблем машиноведения РАН (Санкт-Петербург), а также некоторые экспериментальные результаты.

Ключевые слова: *кибернетическая нейронаука, нейронные модели, интерфейс мозг-компьютер, ИМК, электроэнцефалография, ЭЭГ, управление движением, моторное воображение, мобильные роботы.*

Введение

Методы вычислительного интеллекта в настоящее время находят многочисленные применения в различных областях науки и техники. За последние три десятилетия сформировалась новая обширная область применения методов вычислительного интеллекта – вычислительная нейронаука [1]. В частности, были разработаны новые методы обработки электроэнцефалографических сигналов (ЭЭГ), открывающие широкие возможности как для медицинской диагностики, так и для лечения психических расстройств. За последние два десятилетия количество исследований, связанные с применением кибернетических методов в нейронауке, значительно увеличилось. Такой рост во многом обусловлен развитием интерфейсов мозг-компьютер (ИМК). Более того, использование ИМК открывает новые возможности для медицинской реабилитации после тяжёлых инсультов, черепно-мозговых травм и других нарушений, связанных с двигательными и коммуникативными проблемами. Нейроинтерфейсы позволяют человеку осуществлять движения, которые иначе были бы неосуществимы.

Кибернетические методы в сочетании с технологиями ИМК в настоящее время используются для моделирования биологических нейронных сетей, оценки их параметров и, наконец, для решения задач управления, которые иначе не могли бы быть реализованы. Совокупность существующих и новых задач и методов составляет содержание новой области, которую можно назвать кибернетической нейронаукой [2, 3]. В данном докладе представлен обзор некоторых недавних результатов в области кибернетической нейронауки, полученных в Институте проблем машиноведения, а также описание стенда ИМК, позволяющего реализовывать и тестировать методы анализа и классификации ЭЭГ сигналов в задаче распознавания намерений совершить движение.

Задачи и модели кибернетической нейронауки

Основные задачи кибернетической нейронауки можно разделить на несколько классов и подклассов следующим образом.

Класс 1. Задачи, связанные с изучением математических моделей нейронной динамики, а именно:

(А) Анализ условий, при которых нейронные модели процессов демонстрируют особые типы сложного поведения, такие как синхронизация, десинхронизация, спайки, пачечные разряды (берсты), солитоны, хаос, химеры и так далее.

(B) Синтез внешних (управляющих) воздействий, создающих особое поведение в моделях мозга.

(C) Оценивание состояния и параметров моделей мозга по результатам измерения входных и выходных переменных.

Класс 2. Задачи, связанные с обработкой реальных данных, включающие два подкласса:

(D) Классификация состояний и намерений человеческого мозга (с использованием методов адаптации и машинного обучения).

(E) Разработка алгоритмов управления, обеспечивающих заданные свойства замкнутой системы, состоящей из управляемой нервной системы и устройства управления.

Существует множество моделей нейронной активности: модель «Integrate and fire» (1907), модель Ходжкина-Хаксли (1952), модель ФитцХью-Нагумо (1961), модель Вильсона-Коуэна (1972), модель Моррис-Лекара (1981), модель Хиндмарша-Роуза (1984), нейромассовые модели (1975, 1995), модель Ижикевича (2000), а также дискретные модели нейронов (модель Рулькова, модель Чиалво и так далее). Среди всех этих моделей, одной из самых используемых является модель ФитцХью-Нагумо (ФХН) [4, 5]:

$$\begin{cases} \dot{u} = u - \frac{u^3}{3} - v + I_{ext}, \\ \dot{v} = \varepsilon(a - u - bv), \end{cases} \tag{1}$$

где $u(t)$ – мембранный потенциал (измеряемый выход y), $v(t)$ – переменная восстановления, I_{ext} – внешний ток (вход).

Активность ансамбля нейронов может быть описана с помощью сетевой модели ФХН:

$$\begin{cases} \dot{u}_i = u_i - \frac{u_i^3}{3} - v_i + I_{i,ext} + C_i \sum_{j=1}^{N} G_{ij} \varphi\left(u_i(t) - u_j(t-\tau_i)\right), \\ \dot{v}_i = \varepsilon(u_i - a_i - b_i v_i), \qquad i = 1, \dots, N, \end{cases} \tag{2}$$

где τ_i – временные задержки, G_{ij} – матрица связей сети, C_i – сила связей между узлами. С учётом результатов проекта Human Connectome [6], модель (2) с разумным числом узлов N может аппроксимировать поведение мозга в целом как в нормальных условиях, так и при некоторых патологиях (например, эпилепсии). Входы/выходы могут определяться для каждого узла отдельно либо через измерения ЭЭГ. Очевидно, что модель ФХН является феноменологической и описывает динамику мембранного потенци-

ала, но не учитывает многие нейротрансмиттерные, глиальные и пространственные факторы. Однако адаптивные версии модели ФХН обладают более высокими аппроксимирующими возможностями.



Рис. 1. Фрагмент ЭЭГ сигнала и его аппроксимация адаптивной моделью ФХН

За счёт онлайн-подстройки оценок параметров модели ошибка аппроксимации сигналов ЭЭГ может быть приемлемой для задач классификации, как видно из рис. 1.

Результаты ряда исследований, см., например, [7], показывают, что сеть систем ФХН может демонстрировать режимы выходного сигнала, близкие к патологическим, в частности, поведение, предшествующее эпилептическому приступу.

Типичным примером задачи анализа (подкласс A) является задача синхронизации. Условия синхронизации для гетерогенных сетей ФХН предложены в [8]. Метод синтеза синхронизации гетерогенных сетей ФХН (подкласс B) и условия его реализуемости предложены в [9].

Важный подкласс (C) задач кибернетической нейронауки связан с оцениванием состояния и параметров моделей мозга. В типичной постановке задачи предполагается, что для измерения доступны только мембранные потенциалы $u_i, i = 1, \dots, N$. Для разработки алгоритма оценивания параметров сети (например, параметров $a_i, b_i, C_i, \varepsilon$ в уравнениях сети ФХН (2)) уравнения должны быть приведены к виду, содержащему только измеряемые величины. Если в уравнениях присутствуют производные по времени

от измеряемых величин, используются приближённые дифференцирующие фильтры. Затем уравнения приводятся к виду, линейному относительно некоторых новых неизвестных параметров, являющихся функциями исходных:

$$y_*(t) = \theta_*^T z(t) + \varphi(t), \tag{3}$$

где $y_*(t)$ – измеряемый выход, θ_* – новый вектор неизвестных параметров, требующий оценки, $z(t)$ – вектор измеряемых величин и $\varphi(t)$ – ограниченное возмущение (ошибка аппроксимации).

Тогда вектор оценок неизвестных параметров $\theta(t)$ и оценка $y(t)$ переменной $y_*(t)$, связаны следующим образом: $y(t) = \theta(t)^T z(t)$. Чтобы построить такие оценки параметров можно использовать, например, метод скоростного градиента с зоной нечувствительности [10]:

$$\begin{cases} \dot{\theta} = \gamma\delta(t)z(t), & \text{при } |\delta(t)| > \Delta, \\ \dot{\theta} = 0, & \text{при } |\delta(t)| \le \Delta, \end{cases} \tag{4}$$

где $\delta(t) = y_*(t) - y(t)$ и Δ – порог точности: $\Delta > \Delta_* \ge |\varphi(t)|$. Математические условия применимости такого алгоритма получены в [10] для случая гомогенной сети.

Основы разработки ИМК

Одним из важных направлений в робототехнике и нейроинформатике является разработка и исследование интерфейсов мозг-компьютер (ИМК). Эти системы предназначены для преобразования физиологических сигналов мозга в команды управления внешними устройствами. Поскольку ИМК устанавливают обратную связь от внешнего устройства к оператору-человеку, они представляют интерес для многих приложений.

Наиболее распространённым неинвазивным методом регистрации мозговой активности является электроэнцефалография (ЭЭГ), фиксирующая динамику электрических потенциалов на поверхности скальпа. ЭЭГ обладает высоким временным разрешением, что делает подходящим инструментов в задачах управления в реальном времени, хотя пространственная локализация источников сигнала при этом ограничена. Обзоры [12] и [13] систематизируют подходы к построению ИМК и подтверждают применимость ЭЭГ в таких задачах.

Особый интерес для управления движением внешнего устройства представляют вызванные потенциалы и ритмические паттерны, связанные с движением и моторным воображением, в частности, сенсомоторная десинхронизация в μ- (8–13 Гц) и β- (13–30 Гц) диапазонах над моторной корой.

Эти изменения могут наблюдаться как при реальном движении, так и при представлении (воображении) движения испытуемым [14]. С инженерной точки зрения задача разработки ИМК сводится к обнаружению, выделению и классификации информативных участков сигнала ЭЭГ, соответствующих намерениям пользователя, с минимальной задержкой и достаточной устойчивостью к шумам сигнала.

Однако, эта задача является достаточно непростой. Во-первых, управление должно осуществляться в реальном времени и максимально быстро реагировать на возникновение у испытуемого намерения выполнить определённое движение: последовательные этапы получения сигнала, предобработки, распознавания, формирования команды и передачи её исполнительному устройству должны укладываться в миллисекунды, чтобы обеспечить субъективно комфортный и безопасный отклик. Во-вторых, сигнал ЭЭГ крайне зашумлён и неоднозначен из-за помех электрической сети, артефактов мышечных сокращений и огромной сложности человеческого мозга. Обнаружение паттернов, указывающих на намерения человека, является поэтому весьма нетривиальной задачей. Кроме того, мозг каждого человека уникален, поэтому любое решение должно обладать способностью адаптироваться к каждому конкретному пользователю. Эти факторы объясняют, почему, несмотря на существующие решения, ИМК пока не получили широкого распространения: они не всегда способны достичь достаточно высокой точности в реальных условиях и требуют персонализированной калибровки на экспериментальных стендах.

Описание стенда ИМК

Стенд для исследования ИМК, разработанный в ИПМаш РАН состоит из нескольких частей. В первую очередь, это программное обеспечение, реализующее анализ ЭЭГ сигналов (из предварительно записанных данных или онлайн сигналов) и управление внешним устройством. Схематический обзор этого программного обеспечения показан на рис. 2.

Модули предобработки и анализа поддерживают расширение методов, что позволяет настраивать систему под конкретные аппаратные конфигурации и экспериментальные условия. В частности, поддерживаются такие методы фильтрации как полосовые фильтры, PCA, ICA, CSP и другие алгоритмы.

Принятие решения о формировании управляющего воздействия осуществляется следующим образом. Внутри каждого двухсекундного фрагмента ЭЭГ-сигнала (кадра) осуществляется классификация мгновенных векторов значений ЭЭГ: каждый из векторов относится к одному из возможных классов, соответствующих намерению совершить конкретное дви-

жение управляемого устройства. Затем внутри кадра вычисляется количество векторов, отнесенных к каждому из классов, (частота) и на основании этих величин формируется управляющее воздействие. Например, в простейшем случае с двумя классами, представляющими намерение движения влево или вправо, правило принятия решения имеет вид:

$$\Delta P = P_L - P_R, \tag{5}$$

$$u = \begin{cases} 1, \Delta P > 0.2, \\ -1, \Delta P < -0.2, \\ 0, \text{иначе}, \end{cases} \tag{6}$$

где P_L, P_R обозначают соответствующие частоты (лево, право) для каждого двухсекундного отрезка.

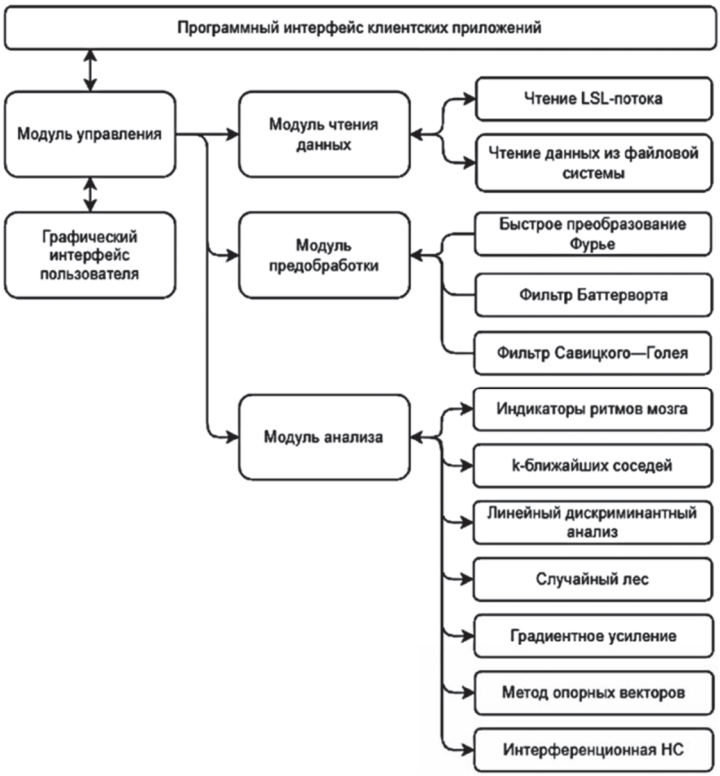


Рис. 2. Архитектура программного обеспечения [15]

Классификация каждого мгновенного отсчёта ЭЭГ выполняется с помощью выбранного алгоритма классификации. Могут использоваться общие методы машинного обучения (например, метод опорных векторов (SVM), метод k ближайших соседей (kNN), нейронные сети и др. [16]). В библиотеку включены также некоторые оригинальные алгоритмы, например, FANN – Fuzzy Almost Nearest Neighbors. FANN − это модифицированный алгоритм kNN, основанный на нечёткой логике, ранее предложенный авторами в [11]. Суть алгоритма FANN заключается во введении нечёткости в параметр k стандартного алгоритма kNN. Это ослабляет зависимость результата классификации от выбора k. Кроме того, могут использоваться алгоритмы, специфичные для нейронной активности. Такие алгоритмы могут быть основаны на применении адаптивных математических моделей нейрональной активности, например, адаптивной модели ФХН [10, 17].



Рис. 3. ИМК: испытуемая в шапочке для ЭЭГ и мобильный робот-тележка [18]



Рис. 4. ИМК: испытуемый в шапочке для ЭЭГ на инвалидном кресле [18]

В качестве внешних устройств на данный момент в стенде поддерживаются робот-тележка TRIK, управляемый испытуемым, неподвижно сидящим рядом с роботом (рис. 3), и инвалидное кресло с электроприводом MET COMPACT 15, управляемая испытуемым, сидящим в ней (рис. 4). Для робота TRIK используется усилитель Mizar-EEG (31 канал), а для коляски - усилитель NeoRecCAP (21 канал). В обоих случаях электроды располагаются согласно системе 10/20. Задачи управления для этих двух устройств схожи, но различаются позой испытуемого, что вносит свои особенности в сигнал ЭЭГ.

Пример тестирования ИМК

Рассмотрим задачу классификации по сигналу ЭЭГ воображаемых движений обеих рук для управления инвалидным креслом. Для тестирования алгоритмов на этой задаче классификации было проведено несколько сессий записи ЭЭГ. Всё время записи было разделено на несколько интервалов – эпох, каждая продолжительностью 6–10 с. Каждая эпоха начиналась со звукового сигнала, указывающего испытуемому, в какую сторону повернуть кресло (влево или вправо). Задача испытуемого в течение каждой эпохи состояла в попытке вообразить движение левой или правой рукой (в зависимости от звукового сигнала).

Таблица 1

Точность классификации для метода FANN и некоторых стандартных алгоритмов классификации

№	Метод	Параметры	Точность классификации
1	FANN	$f = 2\times10^{-6}$	0,93
2	kNN	$k = 5$	0,93
3	Random Forest	$n = 200$	0,86
4	LGBM	$n = 200$	0,66
5	LDA		0,60
6	SVM		0,49
7	Linear Regression (Ridge Classifier)	$\alpha = 10$	0,49

Разметка набора данных выполнялась автоматически на основе типа эпохи. Объём набора данных для тестирования алгоритмов составил 40 эпох на класс (левая или правая рука), всего 4500 элементов. Размер обучающей выборки составил 80% от общего набора данных. В качестве предварительной обработки использовался фильтр Баттерворта с полосой пропускания от 8 до 40 Гц. Это позволило снизить влияние мышечных артефактов на анализируемые сигналы.

В табл. 1 представлены алгоритмы машинного обучения, которые были протестированы в этой задаче. Столбец «Параметры» указывает выбранные параметры алгоритма, обеспечившие наилучший результат для данного алгоритма.

Заключение

Описанный в данной работе стенд для тестирования ИМК в настоящее время находится в стадии разработки. Реализованы распознавание и классификация намерений движения на основе методов машинного обучения с приемлемой точностью классификации.

Представленная работа описывает практическую реализацию ИМК для управления мобильными роботами и инвалидного кресла с электроприводом, охватывающую полный цикл задач обработки ЭЭГ: считывание данных, предобработку, выделение признаков, классификацию и формирование управляющих команд. Программная архитектура является модульной и адаптируемой, что упрощает интеграцию новых методов. Продемонстрирована работа систем в режиме онлайн.

Ключевой вклад работы состоит в создании самого стенда тестирования ИМК и новых методов классификации, основанных на кибернетических принципах, например, в разработке новых информативных признаков для классификации на основе адаптивного оценивания параметров модели нейрона. Выбор типа модели, набора настраиваемых параметров, алгоритмов настройки/адаптации и их параметров зависит от рассматриваемой задачи.

В будущем планируется расширение набора управляющих команд, увеличение числа испытуемых и продолжительности сессий, а также разработка новых методов классификации. Оценка эффективности решения в условиях, близких к реальным условиям использования, а также анализ и учет пользовательского опыта являются ключевыми задачами для обеспечения масштабирования и широкой доступности разрабатываемых решений.

Список литературы

1. 20 years of Computational neuroscience / Ed. by James M. Bower. Berlin: Springer, 2013.

2. Fradkov A.L. Definition of cybernetical neuroscience. https://arxiv.org/abs/2409.16314.

3. Babich N. et al. Outline of cybernetical neuroscience // Cybernetics and Physics. 2025. V. 14. No 1. P. 13-18.

4. FitzHugh R. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane // Biophysical Journal. 1961. V. 1. P. 445–466. doi:10.1016/s0006-3495(61)86902-6.

5. Nagumo J., Arimoto S., Yoshizawa S. An active pulse transmission line simulating nerve axon // Proceedings of the IRE. 1962. V. 50. No 10. P. 2061-2070.

6. Tzourio-Mazoyer N., Landeau B., Papathanassiou D., Crivello F., Etard O., Delcroix N., Mazoyer B., Joliot M. // NeuroImage. 2002. V. 15. No 1.

7. Gerster M., Berner R., Sawicki J., Zakharova A., Škoch A., Hlinka J., Lehnert K., Schöll E. FitzHugh–Nagumo oscillators on complex networks mimic epileptic-seizure-related synchronization phenomena // Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science. 2020. V. 30. P. 123130.

8. Plotnikov S.A., Lehnert J., Fradkov A.L., Schöll E. Synchronization in heterogeneous FitzHugh-Nagumo networks with hierarchical architecture // Phys. Rev. E. 2016. V. 94. P. 012203.

9. Plotnikov S.A., Lehnert J., Fradkov A.L., Schöll E. Adaptive control of synchronization in delay-coupled heterogeneous networks of FitzHugh-Nagumo nodes // International Journal of Bifurcation and Chaos. 2016. V. 26. No 4. P. 1650058.

10. Rybalko A., Fradkov A. Estimating FitzHugh–Nagumo Network Parameters Under Bounded Disturbances // International Journal of Bifurcation and Chaos. 2026. V. 36. No. 09. P. 2650117.

11. Фрадков А.Л., Бабич Н.А. Трёхпозиционное управление транспортным средством на основе нейроинтерфейса с использованием машинного обучения // Информатика и автоматизация. 2025. Т. 24. № 1. С. 5–29.

12. Nicolas-Alonso L.F., Gomez-Gil J. Brain computer interfaces, a review // Sensors. 2012. V. 12. No 2. P. 1211–1279.

13. Abiri R. et al. A comprehensive review of EEG-based brain-computer interface paradigms // Journal of Neural Engineering. 2019. V. 16. No 1. 011001.

14. Lotze M., Halsband U. Motor imagery // Journal of Physiology-Paris. 2006. V. 99. No. 4-6. P. 386–395.

15. Бабич Н.А. Программная платформа для считывания, обработки и анализа данных ЭЭГ // Программная инженерия. 2023. Т. 14. № 5. С. 254–260. doi:10.17587/prin.14.254-260.

16. Babich N., Fradkov A. Brain controlled wheelchair: system description and fuzzy almost nearest neighbours classification // Proc. 6th Int. Conf. Neurotechnologies and Neurointerfaces (CNN, IEEE). Kaliningrad, 2024. P. 11–14. doi:10.1109/CNN63506.2024.10705827.

17. Рыбалко А.В., Карамышев Э.Н. и др. Динамические модели нейронной активности как инструмент анализа намерений совершить движение в сигнале ЭЭГ. IX Международная научно-практическая конференция «Интерфейс мозг-компьютер: наука и практика». Самара, 21–22 мая 2026 г.

18. Как петербургские учёные разрабатывают инвалидную коляску, управляемую силой мысли [Электронный ресурс] // Санкт-Петербург, телеканал. 2025. URL: https://tvspb.ru/news/2025/09/10/kak-peterburgskie-uchenye-razrabatyvayut-invalidnuyu-kolyasku-upravlyaemuyu-siloj-mysli.

M. DEEB
Bauman Moscow State Technical University (BMSTU), Moscow
deebm@student.bmstu.ru

A MULTIDIMENSIONAL NEURAL FINGERPRINT OF IMAGINED WORDS FROM EEG: INTEGRATING TEMPORAL, SPATIAL, SPECTRAL, AND EXPLAINABLE-AI EVIDENCE

Establishing a neural fingerprint for imagined speech remains elusive. This work characterizes four directional words through temporal, spectral, and spatial EEG descriptors rather than classification accuracy. Three independent methods – SHAP, random-forest importance, and EEGNet attention – converged on channels 14, 16, and 18. The fingerprint distinguished imagination from rest (52,75 % balanced accuracy, $p < 0{,}01$), with a summary table linking each word to its channel, band, window, and power direction.

Keywords: *EEG, imagined speech, brain-computer interface, ERP, PSD, neural fingerprint, EEGNet, topographic mapping, explainable AI.*

Introduction

Brain-computer interfaces (BCIs) that rely on imagined, rather than overtly articulated, speech promise a control channel that does not depend on residual motor or vocal function [1, 2]. The appeal is obvious: a user need only think a word for the system to act. What is far less obvious, and still debated in the literature, is whether a given imagined word leaves behind a signature in scalp EEG that is specific enough to be told apart from other words, or whether the dominant signal is simply “imagination is happening” without further semantic detail [3, 4].

Much of the existing work has approached this question through the lens of classification accuracy: a set of features is proposed, a classifier is trained, and the resulting accuracy is taken as a proxy for how well the words are encoded in

the signal. This is a reasonable strategy, but it collapses a great deal of potentially informative structure – timing, scalp topography, frequency content – into a single number.

Here we take a different, complementary route. Rather than optimizing a classifier, we build a neural fingerprint for each imagined word: a multidimensional description that combines temporal power dynamics, spectral-spatial power distribution, scalp topography, SHAP-based attribution, and the internal representations learned by a convolutional network. The underlying premise is that even where automatic classification is hard, as is typically the case for imagined speech at modest sample sizes [3, 5], the individual descriptors that compose the fingerprint can still be extracted, cross-checked against one another, and shown to be reproducible.

Related Work

Early attempts at decoding imagined or covert speech from EEG relied largely on hand-crafted spectral and spatial filters. DaSalla et al. showed that vowel imagery could be separated using common spatial patterns applied to a small set of vowels [6], and Brigham and Kumar reported classification of imagined words using autoregressive features in a silent-communication paradigm [7]. Zhao and Rudzicz extended this line of work to phonological categories, combining several channel groups and classical classifiers [8].

Riemannian-geometry approaches, in which trial covariance matrices are mapped onto a tangent space before classification, have since become a common baseline for imagined-speech and motor-imagery BCIs [9, 10]; reported accuracies for multi-word imagined-speech tasks nonetheless remain moderate, typically in the range of 30–65 % depending on the number of classes and participants, which is consistent with the view that the underlying signal is weak rather than that the methods are inadequate. More recent work has turned to deep learning, with compact architectures such as EEGNet and deeper convolutional models achieving competitive results across a range of BCI paradigms while requiring comparatively little manual feature engineering. Explainable-AI techniques, and SHAP in particular, have increasingly been used alongside such models to recover which channels, bands, or time windows a classifier is actually relying on, rather than treating it as a black box [5]. A comprehensive review of covert-speech decoding, including the persistent difficulty of separating individual imagined words as opposed to detecting the act of imagination itself, is given by Panachakel and Ramakrishnan [3]. The present work draws on this line of reasoning but shifts the emphasis from classifier benchmarking to the joint, cross-

validated description of a fingerprint assembled from several complementary analyses.

Materials

EEG data were recorded from five participants using a 24-channel system arranged according to the international 10-20 layout, sampled at 1000 Hz. Each participant completed two experimental runs of 100 trials, imagining the pronunciation of one of four directional words – Right, Left, Up, and Down – or resting quietly (Idle), which served as the reference condition. Every trial lasted 4 s (4000 samples). After the exclusion of artefact-contaminated trials, the final dataset comprised 997 trials: 200, 199, 198, 200, and 200 for Right, Left, Up, Down, and Idle respectively, distributed almost evenly across the five participants (199–200 trials each).

Methods

1. Preprocessing. Raw signals were band-pass filtered between 1 and 45 Hz and notch-filtered to remove line noise, then re-referenced to the common average across channels. Trials whose peak amplitude exceeded five standard deviations of the subject-wise mean were discarded as artefacts. All subsequent features were computed on a per-subject Z-scored basis, i.e. for every subject each feature was normalized using that subject's own mean and standard deviation, so as to remove gross inter-subject differences in signal amplitude before pooling the data.

2. Temporal and Spectral Fingerprint Components. For each trial we computed two complementary descriptors. The first, an ERP-like temporal profile, tracks broadband signal power for every channel across the full 4 s trial, revealing when, rather than only where or at what frequency, a given channel becomes active. The second, a PSD-like spectral-spatial profile, averages the Hilbert-envelope power of the band-pass-filtered signal within five canonical bands – theta (4–8 Hz), alpha (8–13 Hz), low beta (13–20 Hz), high beta (20–30 Hz), and gamma (30–45 Hz) – over four consecutive 1 s windows, yielding a channel × band × window representation of dimensionality $24 \times 5 \times 4 = 480$ per trial.

3. Topographic Mapping. To recover the spatial component of the fingerprint, the time-averaged power of each band was projected onto a standard 10–20 scalp montage and rendered as a topographic map for every word, allowing the spectral profile of Section 2 to be interpreted in terms of cortical location rather than channel index alone.

4. Explainable AI: SHAP. A random-forest classifier was trained on the channel × band × window feature vectors, and SHAP (SHapley Additive exPlanations) values were computed via a tree explainer to attribute the model's output to individual features. This provides an independent, model-based ranking of which channel-band-window combinations carry the most discriminative weight, complementing the purely descriptive profiles of Sections 2–3.

5. EEGNet with Channel Attention. In parallel, a compact convolutional network in the style of EEGNet was trained directly on the raw (down-sampled) trial signal, with a channel-attention module inserted before the temporal convolution stage. This module learns a soft weighting over the 24 input channels, which we extract after training as a further, purely data-driven estimate of channel importance — one that is not informed by the hand-crafted features used in Sections 2 and 4, and that therefore constitutes an independent check on the same question.

6. Statistical Validation. Two complementary validation schemes were used throughout: stratified five-fold cross-validation, and leave-one-subject-out (LOSO) cross-validation, the latter probing whether a pattern learned on four subjects generalises to a held-out fifth. Statistical significance relative to chance was assessed with a permutation test (200 permutations for classification tasks; 5000 relabelling permutations for the single-feature tests reported in Table 1, with Benjamini–Hochberg false-discovery-rate correction applied across that family of five comparisons). In addition, an exhaustive sliding-window search (200 ms windows, 4000 samples in total) were performed across the full trial duration to locate any interval in which the four words could be separated with above-chance reliability.

7. Implementation Details. The random-forest classifier used for both the importance analysis and the SHAP explainer was configured with 300 trees, a maximum depth of 8, and class-balanced sample weighting. EEGNet was trained with the Adam optimizer (learning rate 1×10^{-3}, weight decay 1×10^{-4}), a batch size of 32, and 40 epochs per cross-validation fold, on the input signal down-sampled by a factor of 4 (effective 250 Hz). The temporal convolution stage used 32 filters of length 25 samples, followed by a depth wise convolution of 64 filters of length 15 samples (groups = 32); the channel-attention module was implemented as a squeeze-and-excitation-style block (global average pooling followed by two fully connected layers and a sigmoid gate) applied to the 24 input channels prior to the temporal convolution.

Results

The temporal profile (Fig. 1) is not featureless: it contains brief, localized bursts of activity that recur at reproducible latencies. For Right, a marked burst appears in channel 13 around 2,2 s into the trial; for Idle, a comparable burst appears in channel 22 around 1,5 s. Both classes also show a shared rise in power near the trial edges, most likely a filtering artefact common to all conditions rather than a word-specific feature. The word-specific bursts, by contrast, form the temporal component of the fingerprint summarized in Table 1.

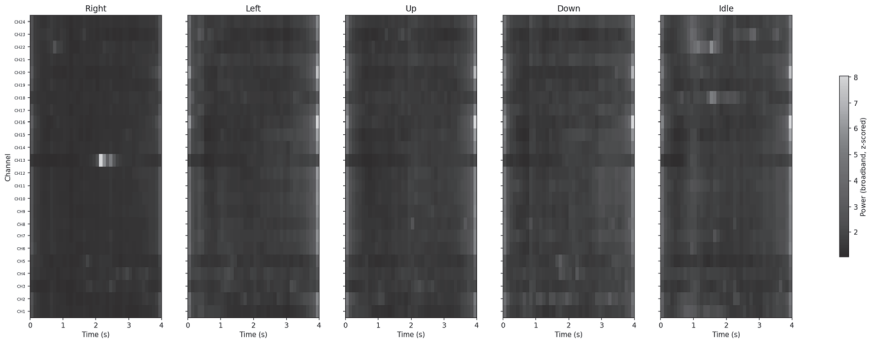


Fig. 1. Temporal power profile (ERP-like dynamics) across channels for each word

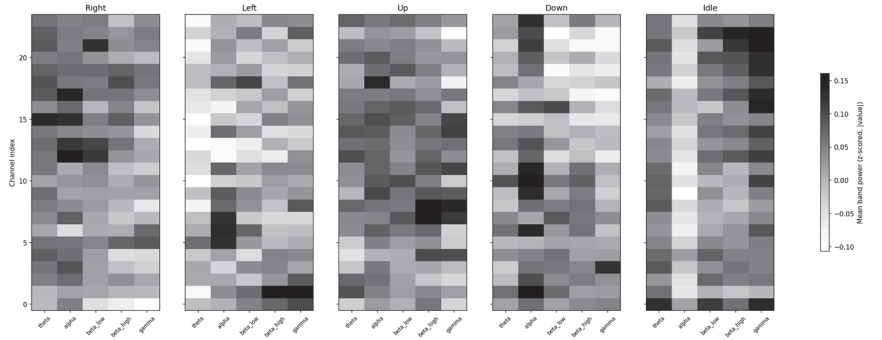


Fig. 2. Spectral-spatial power profile (PSD-like characteristic) across channels and frequency bands for each word

Table 1

Summary neural fingerprint for each word

Word	Ch.	Band	Dir.	Window	z	d	p (raw)	q (FDR)	Sig.
Right	CH13	alpha	↑	3–4s	+0,124	0,26	0,0010	0,0025	✓
Left	CH11	theta	↓	2–3s	−0,084	0,12	0,135	0,135	–
Up	CH23	gamma	↓	2–3s	−0,121	0,20	0,0114	0,0190	✓
Down	CH23	beta-low	↓	0–1s	−0,116	0,18	0,0228	0,0285	✓
Idle	CH22	gamma	↑	3–4s	+0,160	0,33	0,0002	0,0010	✓

Table 1 draws together the temporal and spectral analyses into a single per-word summary: the channel, band, direction of power change relative to the subject-wise baseline, the time window in which that change is largest, and its statistical support. Right is characterized by an increase in alpha power in channel 13 during the late window (3–4 s); Left, by a decrease in theta power in channel 11; Up and Down, by decreases in gamma and low-beta power respectively, both localized to channel 23; and Idle, by the largest single change of any condition – a pronounced increase in gamma power in channel 22 during the late window. Four of these five descriptors remain statistically significant after false-discovery-rate correction (Table 1), lending confidence to the corresponding components of the proposed fingerprint.

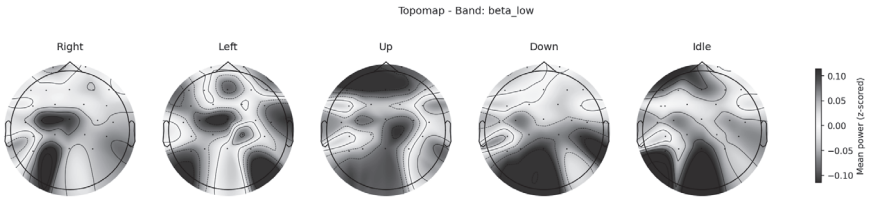


Fig. 3. Scalp topography of low-beta power for each class

The topographic maps (Figs. 3, 4) add the spatial dimension to the fingerprint. Right shows a localized increase in low-beta power over central-temporal sites, whereas Idle shows a much broader increase spanning both the low-beta and gamma bands across most of the scalp – the most spatially extensive pattern among the five conditions, and one that is qualitatively distinct from any of the imagined words.

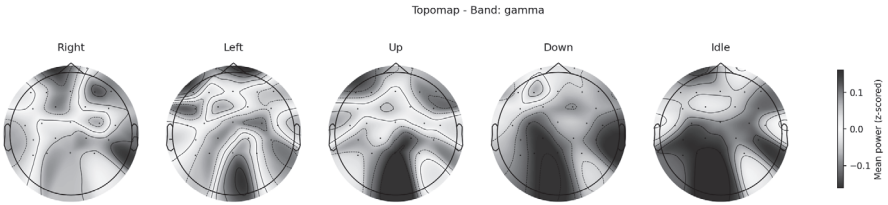


Fig. 4. Scalp topography of gamma power for each class

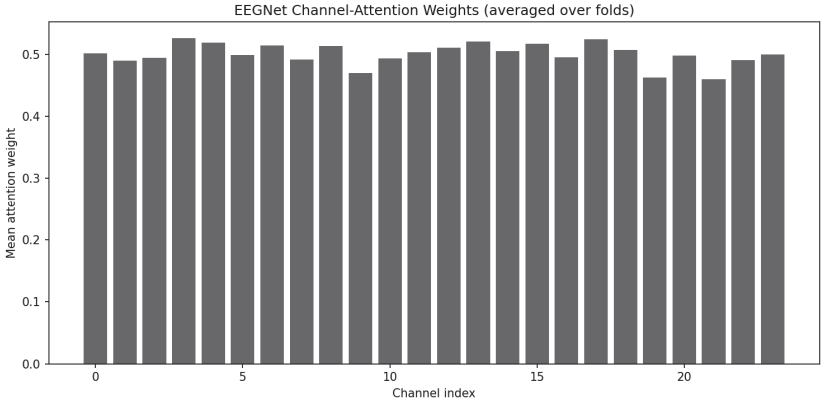


Fig. 5. EEGNet channel-attention weights, averaged over five cross-validation folds

Trained without access to the hand-crafted band-power features, EEGNet's attention module arrived at a channel weighting of its own (Fig. 5), with the largest weights assigned to channels 4, 18, 14, 5, and 16. Three of these – 14, 16, and 18 – also appear among the channels most strongly implicated by SHAP and by the random-forest importance analysis discussed next, which is a useful piece of corroboration: a network with no knowledge of our feature design nonetheless converged on much the same electrodes.

The SHAP ranking (Fig. 6) is led by low-beta power in the first-time window (0–1 s) for channels 22, 13, and 14, followed by high-beta power in the last window (3–4 s) for channel 17. The aggregated importance maps (Fig. 7) confirm this pattern at a coarser level: early windows dominate for the low-beta and alpha bands, while the late window becomes relatively more important for alpha and high-beta – a timing structure that lines up with the per-word windows already

identified in Table 1. A random-forest importance analysis fitted on the full dataset independently highlighted channels 18, 16, and 13 together with the low-beta and alpha bands, essentially reproducing the SHAP and EEGNet-attention findings. Agreement of this kind across three methods that differ substantially in how they arrive at an importance score – a game-theoretic attribution, an ensemble-tree heuristic, and a learned attention mechanism – is, in our view, the strongest evidence in this study that the spatial component of the fingerprint is not an artefact of any single analysis.

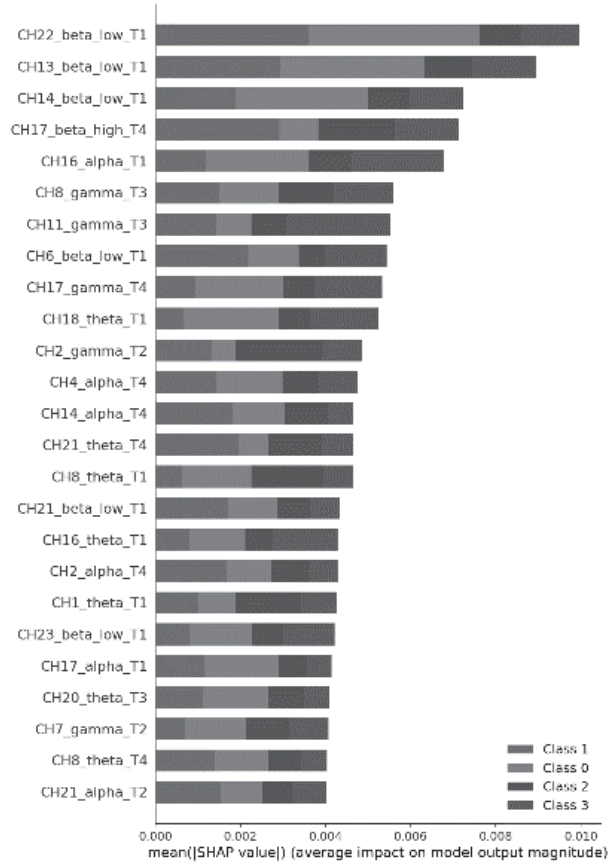


Fig. 6. Most influential features ranked by mean |SHAP| value for the four-word task

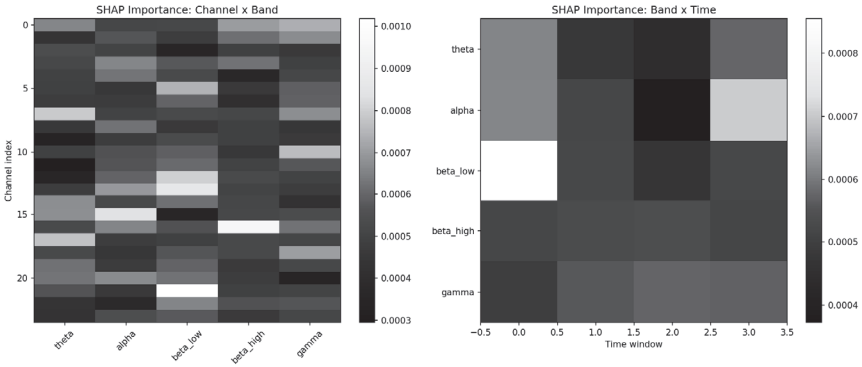


Fig. 7. Aggregated SHAP importance
by channel × band (left) and band × window (right)

The sliding-window search across the full 4 s trial identified the interval around 2,3–2,5 s as the single most informative window among those tested, adding a further temporal landmark to the fingerprint alongside the early and late windows already flagged by SHAP and by the per-word power profiles.

For completeness, we also report the outcome of feeding the full 480-dimensional feature vector into standard classifiers for the four-word task itself. Five-fold cross-validation gave a balanced accuracy of 27,4 % with shrinkage LDA and 24,8 % with a linear SVM, against a chance level of 25 %; leave-one-subject-out accuracy was 25,9 % and 26,6 % respectively, and a permutation test (200 permutations, shrinkage LDA) gave $p = 0{,}119$. Translating the individual, statistically supported descriptors in Table 1 into reliable trial-by-trial classification of all four words is therefore an open task for future work with larger cohorts, and is discussed further in Discussion.

Discussion

The central contribution is not a classifier but a fingerprint: a structured, multi-component description of each imagined word drawing on temporal dynamics, spectral-spatial power, scalp topography, and two independent feature-attribution methods. That SHAP, random-forest importance, and EEGNet's attention mechanism converge on channels 14, 16, 18 is more informative than any single accuracy figure, since the same structure is recoverable by three methods sharing essentially no assumptions.

The pronounced, spatially broad increase in gamma and low-beta power during rest (Figs. 3, 4) is consistent with the expected release of cortical activity when no directed cognitive task is performed. We note that scalp gamma is susceptible to muscle artefact, and this component would benefit from confirmation using concurrent EMG.

The fingerprint components characterize each word individually and are, for four of five words, statistically well supported (Table 1); turning them into a classifier that tells all four words apart in every trial is considerably harder, and accuracy remains close to chance at this sample size–consistent with the imagined-speech literature at comparable scale [3, 9]. We see this as the next milestone rather than evidence against the fingerprint.

Compared with Riemannian and CSP-based pipelines [9, 10], the present approach offers a complementary, interpretability-first description that could be combined with those methods once larger, higher-density datasets become available.

A further limitation concerns vocabulary size. The study covers only four semantically related directional words plus rest; it remains open whether the descriptors identified here would generalise to a larger, more heterogeneous vocabulary. We see this as a necessary extension, not something inferable from four spatially related words alone.

Conclusion

We proposed and evaluated a multidimensional neural fingerprint framework for imagined words, integrating temporal, spectral, and spatial EEG analysis with SHAP-based explain ability and EEGNet attention. A compact summary table links each word to a characteristic channel, frequency band, temporal window, and direction of power change, and the convergence of three independent methods on the same core channels (14, 16, 18) supports the reproducibility of the spatial component of this fingerprint. The composite descriptor also distinguishes the imagined state from rest with statistical significance. Future work should extend the cohort, channel density, and vocabulary size, and examine whether the 2,3–2,5 s window identified here, together with deep representation learning, can improve the separability of individual imagined words.

Data Availability

The processed feature set, analysis code, and summary results supporting this study are publicly available at: https://github.com/DEEB375/EEG_PROJECT.

References

1. Brumberg J.S., Nieto-Castanon A., Kennedy P.R., Guenther F.H. Brain-computer interfaces for speech communication. Speech Commun. 52(4). 367–379 (2010).

2. Wandelt S.K., et al. Representation of internal speech by single neurons in human supramarginal gyrus. Nat. Hum. Behav. 8. 1136–1149 (2024).

3. Panachakel J.T., Ramakrishnan A.G. Decoding covert speech from EEG-a comprehensive review. Front. Neurosci. 15. 642251 (2021).

4. Nguyen C.H., Karavas G.K., Artemiadis P. Inferring imagined speech using EEG signals: a new approach using Riemannian manifold features. J. Neural Eng. 15(1). 016002 (2018).

5. García-Salinas J.S., Villaseñor-Pineda L., Reyes-García C.A., Torres-García A.A. Transfer learning in imagined speech EEG-based BCIs. Biomed. Signal Process. Control 50. 151–157 (2019).

6. DaSalla C.S., Kambara H., Sato M., Koike Y. Single-trial classification of vowel speech imagery using common spatial patterns. Neural Netw. 22(9). 1334–1339 (2009).

7. Brigham K., Kumar B.V.K.V. Imagined speech classification with EEG signals for silent communication: a preliminary investigation into synthetic telepathy. In: Proc. 4th Int. Conf. Bioinform. Biomed. Eng. (ICBBE). P. 1–4. IEEE (2010).

8. Zhao S., Rudzicz F. Classifying phonological categories in imagined and articulated speech. In: Proc. IEEE Int. Conf. Acoust. Speech Signal Process. (ICASSP). P. 992–996. IEEE (2015).

9. Congedo M., Barachant A., Bhatia R. Riemannian geometry for EEG-based brain-computer interfaces; a primer and a review. Brain-Comput. Interfaces 4(3). 155–174 (2017).

10. Lotte F., et al. A review of classification algorithms for EEG-based brain-computer interfaces: a 10-year update. J. Neural Eng. 15(3), 031005 (2018).

Секция

Нейрокомпьютеры, нейроморфные вычисления и импульсные нейронные сети

К.А. ХАМИТОВ, Е.А. РЫНДИН, Н.В. АНДРЕЕВА
Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»
kamilkahamitov@mail.ru

АППАРАТНОЕ ИСПОЛНЕНИЕ ИМПУЛЬСНЫХ НЕЙРОМОРФНЫХ АРХИТЕКТУР, ОРИЕНТИРОВАННЫХ НА ПОВЫШЕНИЕ ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНОСТИ УСТРОЙСТВ ПЕРИФЕРИЙНОГО ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА

Представлена аппаратная реализация импульсной нейронной сети для обработки изображений на периферийных устройствах с учётом разреженности данных и квантизации весов до 3 бит. Преобразование пространственных паттернов в AER-последовательности выполнено на основе пуассоновского частотного кодирования; аппаратное обучение реализовано по четырёхфазному протоколу взаимодействия с SDSP-механизмом пластичности. Верификация проведена на ядре ODIN (256 LIF-нейронов, матрица 256×256) на ПЛИС Tang Primer 25k (GW5A-LV25). Экспериментально подтверждена корректная классификация 9 позиций объекта на фототранзисторной матрице 8×8.

Ключевые слова: *импульсные нейронные сети, пуассоновское частотное кодирование, аппаратное SDSP-обучение, нейроморфный процессор ODIN, LIF-нейрон, AER-интерфейс.*

Введение

Аппаратные нейроморфные процессоры, такие как ODIN [1], SpiNNaker, TrueNorth и Loihi, реализуют вычислительные парадигмы, вдохновлённые биологическими нейронными системами. В отличие от традиционных архитектур фон Неймана, нейроморфные чипы оперируют асинхронными импульсными событиями, передаваемыми через AER-интерфейс (Address-Event Representation) [2], что обеспечивает высокую энергоэффективность на уровне единиц микроватт на импульс [1].

Одной из проблем практического использования таких процессоров является преобразование аналоговых, изменяющихся непрерывно, входных данных в формат импульсных последовательностей, совместимый с рецептивным слоем нейроморфной архитектуры. Это преобразование, называемое нейронным кодированием, в значительной степени определяет качество работы всей нейроморфной системы [3].

Для процессоров с механизмом пластичности SDSP (Spike-Driven Synaptic Plasticity) [1] одним из практически удобных подходов является пуассоновское кодирование, при котором интенсивность определяет вероятность генерации импульса на каждом дискретном временном интервале, выбор данного способа кодирования обусловлен совместимостью с механизмом SDSP пластичности, который опирается на статистику импульсной активности пре-нейронов, а не на точные временные соотношения между импульсами.

Целью данной работы является исследование возможности интегрального исполнения импульсной нейронной сети с on-chip обучением в режиме реального времени для обработки статичных изображений на общедоступных аппаратных платформах.

1. Модели и методы

Для достижения цели исследования была разработана модель системы, состоящей из N LIF-нейронов и синаптической матрицы размером $M \times L$, выполняющей преобразование

$$F: X \rightarrow S, \tag{1}$$

где X – паттерн входного изображения $R \times C$ пикселей, яркости которых соответствуют диапазону $[0, x_{max}]$; $S = \{(a_k, t_k)\}$ – последовательность AER-событий (a_k – k-ая команда AER трафика, t_k – k-ый отсчет AER-события) удовлетворяющая требованиям:

1) статистической пропорциональности (среднее число импульсов нейрона с номером i пропорционально яркости пикселя x_i);

2) совместимости с SDSP (последовательность импульсов обеспечивает условия потенциации для целевого нейрона);

3) воспроизводимости (идентичность результатов пуассоновского частотного кодирования для одинаковых начальных значений генератора псевдослучайных чисел (ГПСЧ));

4) масштабируемости (поддержка матриц произвольного размера в пределах ресурсов архитектуры).

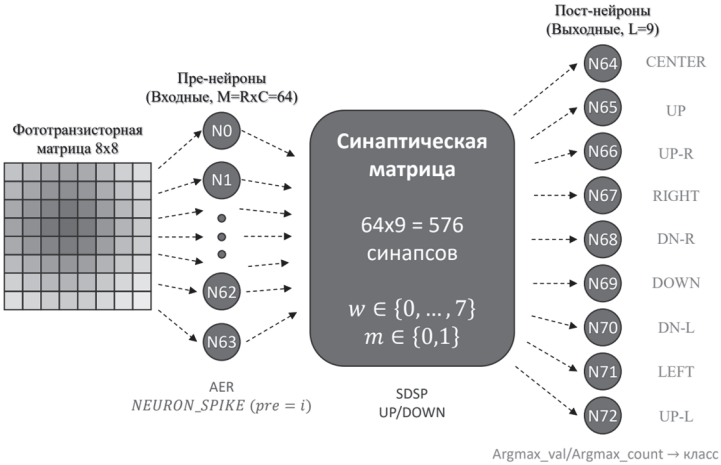


Рис. 1. Архитектура сети для распознавания расположения светового пятна

1.1. Модель LIF-нейрона

Модель LIF-нейрона определяет динамику изменения мембранного потенциала при поступлении входных импульсов в соответствии с выражением:

$$V_{mem,i}(t_{j+1}) = \begin{cases} V_{mem,i}(t_j) + \sum_{k=1}^{K} \varepsilon_k w_{i,k}, & V_{mem,i}(t_j) < V_{thr,i} \\ & \varepsilon_k \in \{-1,0,+1\} \\ 0, & V_{mem,i}(t_j) \geq V_{thr,i} \end{cases} \quad (2)$$

где $V_{mem,i}(t_j) = 0,1,\dots,2^D$ – мембранный потенциал i-го нейрона в момент времени t_j; k – порядковый номер пре-нейрона; $w_{i,k}$ – вес синаптического элемента, соединяющего выход k-го пре-нейрона со входом i-го пост-нейрона; $V_{thr,i}$ – порог срабатывания i-го пост-нейрона; D – разрядность мембранного потенциала.

В рассматриваемой модели процесс утечки LIF-нейрона характеризуется двумя параметрами:

1) интервалом времени T_{ref} между двумя последовательными событиями, в течение которого нейроны могут генерировать импульсы;

2) параметром утечки ΔV_{leak}, определяющим величину, на которую снижаются мембранные потенциалы всех нейронов по окончании каждого интервала T_{ref}.

1.2. Пуассоновское частотное кодирование

При реализации пуассоновского частотного кодирования осуществляется нормализация по максимальному значению яркости в текущем входном изображении, и частота генерации импульсов пре-нейронами определяется выражением:

$$f_i = f_{max}(x_i/x_{max}), \quad (3)$$

где x_{max} – максимальное значение яркости пикселя в текущем входном изображении; f_{max} – частота генерации импульсов, соответствующая максимальной яркости x_{max}.

С учетом выражения (3) вероятность p_i генерации импульса *i*-м нейроном за один период T_{ref} может быть выражена в виде:

$$p_i = f_i/f_{ref} = \left(f_{max}/f_{ref}\right)(x_i/x_{max}) = r(x_i/x_{max}), \quad (4)$$

где $f_{ref} = \frac{1}{T_{ref}}$ – частота следования событий; $r = \frac{f_{max}}{f_{ref}}$ – безразмерный параметр, определяющий максимальную вероятность генерации импульса за период T_{ref}. На каждом интервале $\Delta t_j = T_{ref}$, j = 1, 2, …, J, для каждого *i*-го пре-нейрона генерируется бернуллиевская случайная величина $S_i(\Delta t_j)$:

$$S_i(\Delta t_j) = Bernoulli(p_i) \in [0, 1]. \quad (5)$$

Если $S_i(\Delta t_j) = 1$, генерируется AER-событие с адресом пре-нейрона *i*. Общее число импульсов нейрона i за J временных интервалов Δt_j, j = 1, 2, …, J, является случайной величиной с биномиальным распределением $B(T, p_i)$, математическое ожидание E_i которой:

$$E_i = Jp_i = Jr(x_i/x_{max}). \quad (6)$$

1.3. Механизм SDSP

Согласно принципам SDSP механизма, обновление весов синапсов происходит при поступлении пресинаптического импульса, а знак обновления веса ε_k определяется тем, превышает или нет текущее значение мембранного потенциала пост-нейрона заданный порог η_{mem}. При этом вводится

механизм остановки обучения с использованием «кальциевой переменной» *Ca*, отражающей недавнюю активность пост-нейрона.

В рассматриваемой системе *Ca (3 бита)* задается целым числом в диапазоне от 0 до 7, разделенное тремя порогами η_1, η_2, η_3 – табл.1.

Таблица 1

Таблица поддиапазонов кальциевой переменной

Поддиапазон	**Условие**	**Действие**
DEAD	$Ca < \eta_1$	Нейрон не генерировал импульс недавно, пластичность полностью отключена
Конкурентное обучение	$\eta_1 \le Ca < \eta_2$	Потенциация при $V_{mem,i} \ge \eta_{mem}$ и депрессия при $V_{mem,i} < \eta_{mem}$
LTP (потенциация)	$\eta_2 \le Ca < \eta_3$	Потенциация при $V_{mem,i} \ge \eta_{mem}$, депрессия заблокирована
Насыщение	$Ca \ge \eta_3$	Пластичность отключена

Изменение синаптических весов в процессе SDSP-обучения с учетом кальциевой переменной описывается следующими выражениями:

$$w(t_{j+1}) = w(t_j) + \Delta w_+(t_j) - \Delta w_-(t_j), \; w(t_j) = 0,1,\dots,7; \quad (7)$$

$$\Delta w_+(t_j) = \theta(V_{mem} - \eta_{mem}) \cdot \theta(Ca - \eta_1) \cdot \theta([\eta_3 - 1] - Ca); \quad (8)$$

$$\Delta w_-(t_j) = \theta(\eta_{mem} - V_{mem}) \cdot \theta(Ca - \eta_1) \cdot \theta([\eta_2 - 1] - Ca), \quad (9)$$

где $w(t_j), w(t_{j+1})$ – синаптический вес в моменты времени t_j и t_{j+1}; $\Delta w_+(t_j), \Delta w_-(t_j)$ – изменение синаптического веса при потенциации и депрессии, соответственно; θ – функция Хевисайда.

1.4. Генерация входных паттернов

Для проверки системы частотного кодирования был разработан генератор входных паттернов, моделирующий рецептивные поля с управляемой гауссовой формой (рис. 2).

Данный генератор описывает каждый класс входных изображений двумерным гауссовым распределением с центром (μ_r, μ_c) и дисперсией σ:

$$x_{\{r,c\}} = \lceil x_{max} exp(0.5 \cdot (-((r - \mu_r)^2 + (c - \mu_c)^2))/\sigma^2) \rceil . \quad (10)$$

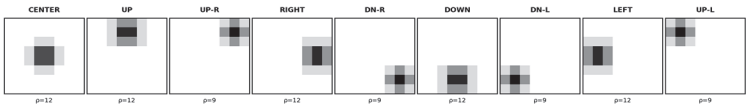


Рис. 2. Входные паттерны размером 8×8 пикселей, с максимальной яркостью $x_{max} = 7$ и дисперсией $\sigma = 0{,}8$ (ρ – число пикселей с ненулевой яркостью)

Параметр σ определяет разреженность паттерна (число пикселей ρ с ненулевой яркостью), критичную для SDSP-обучения: нецелевые нейроны не получают сигнала учителя и накапливают потенциал пропорционально ρ, поэтому для исключения ложных срабатываний необходимо, чтобы за T_{ref} периодов их мембранный потенциал не достигал $V_{thr,i}$. Выбор σ, удовлетворяющий этому условию, определяется выражением (10).

1.5. Аппаратное обучение на базе четырехфазного протокола взаимодействия с SDSP механизмом

Обучающая последовательность AER-событий организована в четырёхфазный протокол для каждого класса в каждой эпохе обучения.

Фаза 0 – инкремент кальциевой переменной $Ca(i^*)$ целевого нейрона i^* выше порога η_1, что является необходимым условием потенциации в SDSP. В этой фазе генерируется серия S_{sp} событий, каждое из которых добавляет приращение ΔV_{sp} к текущему значению мембранного потенциала $V_{mem,i*}$ целевого пост-нейрона. При достижении порога $V_{mem,i*} \geq V_{thr,i*}$, нейрон срабатывает, сбрасывая мембранный потенциал $V_{mem,i*}$ и наращивает значение кальциевой переменной $Ca{+}{=}\,1$. Таким образом, число событий определяется выражением:

$$S_{sp} = \lceil V_{thr,i*}/\Delta V_{sp} \rceil (\eta_1 + 1). \quad (11)$$

После завершения фазы мембранный потенциал может содержать остаток $V_{residual}$, который передаётся в Фазу 1 как начальное значение:

$$V_{residual} = \left(S_{sp}\Delta V_{sp}\right) mod\, V_{thr,i*}, \quad (12)$$

где mod – функция остатка от деления.

Фаза 1 – серия S_{pre} событий, каждое из которых добавляет приращение ΔV_{pre} к текущему значению мембранного потенциала $V_{mem,i*}$ целевого пост-нейрона, устанавливая $V_{mem,i*}$ в окно SDSP потенциации $\left[\eta_{mem}, V_{thr,i*}\right)$. Число событий в данной фазе можно определить как:

$$S_{pre} = (\eta_{mem} - V_{residual})/\Delta V_{pre}. \quad (13)$$

Фаза 2 – основное окно обучения. На каждом из J временных интервалов $\Delta t_j = T_{ref}$, $j = 1, 2, \ldots, J$, выполняются три группы событий:

1) для каждого входного нейрона i, у которого бернуллиевская случайная величина S_i, приняла значение 1, запускается обработка данных i-й строки синаптической матрицы, обновляя мембранные потенциалы каждого пост-нейрона и вызывая проверку условий SDSP-потенциации/депрессии;

2) утечка – уменьшение мембранных потенциалов всех нейронов на величину ΔV_{leak} и инкремент счётчика утечки кальциевой переменной;

3) генерация U событий на один период $\Delta t_j = T_{ref}$, каждое из которых добавляет приращение ΔV_{top} к текущему значению мембранного потенциала $V_{mem,i*}$ целевого пост-нейрона, восстанавливая $V_{mem,i*}$ после утечки. Изменение ΔV_{net} мембранного потенциала за один период $\Delta t_j = T_{ref}$, удовлетворяющее условию

$$\Delta V_{net} = U \cdot \Delta V_{top} - \Delta V_{leak} > 0, \quad (14)$$

гарантирует нахождение $V_{mem,i*}$ в окне SDSP-потенциации и устойчивость процесса обучения.

Фаза 3 – полный сброс мембранного потенциала и затухание кальциевой переменной Ca между входными паттернами в результате серии S_{leak} событий, каждое из которых снижает мембранный потенциал на величину ΔV_{leak}. Условие полного сброса мембранного потенциала определяется выражением:

$$S_{leak}\Delta V_{leak} \geq 2 \cdot V_{thr,i}. \quad (15)$$

2. Результаты

Результаты сборки проекта на ПЛИС представлены в табл.2.

В ходе оптимизации ресурсов трассировщиком было получено, что каждый CLS (Configurable Logic Slice) содержит 2 LUT и 2 FF; при утилизации Logic = 39 % и Register = 19 % трассировщик задействовал 6 922 из 11 520 физических слайсов (CLS = 61 %), что означает неполное заполнение позиций внутри слайсов, но высокую плотность размещения. SDSP реализован в виде 8 параллельных комбинаторных модулей (~ 18 LUT каждый), что соответствует архитектуре ASIC-оригинала [1].

Таблица 2

Ресурсы ПЛИС GW5A-LV25MG121 для ядра ODIN (PnR report)

Ресурс	Использовано (после PnR)	Доступно (до PnR)	Утилизация
Logic	8 944	23 040	39%
LUT	8 193	8 195	-
ALU	751	682	-
Register	4 238	23 280	19%
Logic Register as FF	4 226	23 040	-
IO Register as FF	12	240	-
CLS	6 922	11 520	61%
BSRAM (нейроны/синапсы)	4/16	56	36%
I/O	34	82	41%

Экспериментальная верификация проведена на задаче классификации расположения объекта (вверху, внизу, слева, справа, вверху-слева, вверху справа, внизу-слева, внизу-справа). Каждая строка фототранзисторной матрицы подключена к АЦП контроллера Arduino DUE и активируется через входной сдвиговый регистр. Значения яркости оцифровываются 12-битным АЦП с последующим редуцированием в 8-бит и передаются в модуль частотного кодирования (рис. 3).

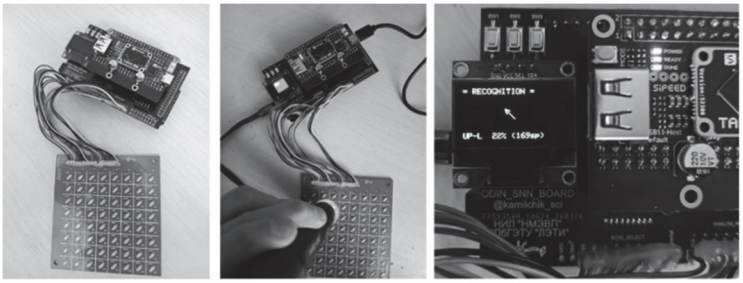


Рис. 3. Реализация нейроморфной системы с аппаратным обучением

Обучающая последовательность AER-событий для K классов и n_{epochs} эпох имеет вид цикла из n_{epochs} итераций, схематически представленного на рис. 4, внутри которого последовательно выполняются фазы 0–3 для каждого из K классов.

Таблица 3

Параметры, используемые при аппаратной реализации режима обучения импульсной нейронной сети

Параметр	Значение	Комментарии
$V_{thr,i}$	150	Порог срабатывания пост-нейронов
η_{mem}	40	Порог потенциации/депрессии
ΔV_{leak}	4	Параметр утечки пост-нейронов
η_1 / η_2 / η_3	1 / 3 / 6	Пороги кальциевой переменной
$r = f_{max}/f_{ref}$	0,3	f_{max} = 6 Гц, f_{ref} = 20 Гц
ΔV_{top}	2	Приращение к V_{mem} в фазе 2 обучения
n_{epochs}	40	Число эпох обучения
σ	0,8	Дисперсия в выражении (10)
w_{init}	2	Начальными вес синапсов

В процессе верификации нейроморфный процессор корректно классифицировал все входные паттерны тестовой выборки.

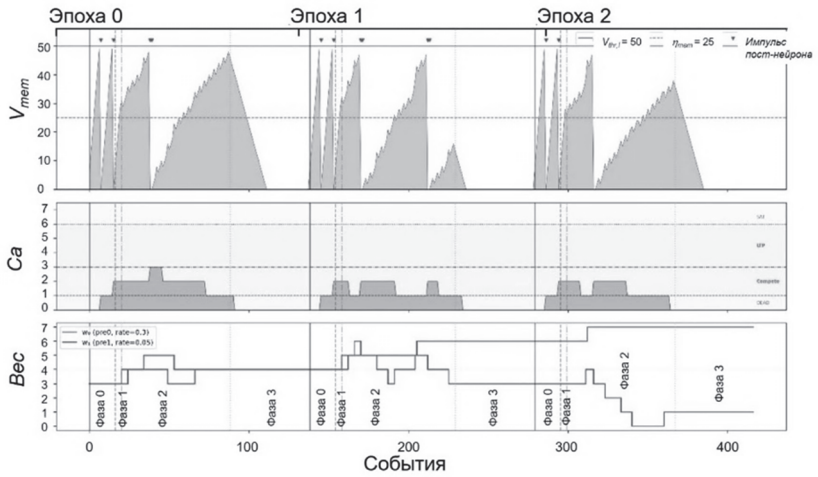


Рис. 4. Пример динамики мембранного потенциала пост-нейрона V_{mem}, кальциевой переменной Ca и синаптических весов в процессе обучения

3. Дискуссия

Задача классификации 9 вариантов расположения гауссова пятна на сетке 8×8 пикселей является относительно простой с точки зрения теории распознавания. Данная работа является примером практического использования задачи распознавания состояния внешнего объекта в технологии краевых вычислений. Вопрос о применимости разработанного стенда и протокола взаимодействия с SDSP механизмом в контексте обработки потока данных N-MNIST формата, остается открытым и требует дальнейшего рассмотрения.

Сравнение точности при разрядностях весов 3/4/8 бит не проводилось, поскольку требует модификации архитектуры ядра. Такое сравнение позволило бы оценить «цену» квантизации и определить минимальную достаточную разрядность; его проведение в программной модели – задача дальнейшего исследования.

Пуассоновский (rate) метод преобразования входных паттернов в спайки выбран, исходя из сравнительного исследования [4], где rate coding уступает альтернативным схемам TTFS – по латентности, burst – по устойчивости к аппаратным дефектам, phase - по устойчивости к входному шуму при использовании STDP-обучения. Однако SDSP в ODIN опирается не на временну́ю разницу спайков, а на состояние пост-нейрона при каждом пресинаптическом событии. В этих условиях многократные спайки rate coding обеспечивают достаточное число SDSP-обновлений за окно предъявления, тогда как одиночный спайк TTFS не позволяет накопить Ca и выполнить систематическую потенциацию. Исследование эффективности альтернативных схем кодирования в сочетании с SDSP-правилом является предметом дальнейшей работы.

Энергопотребление ядра ODIN авторами ядра измерено на 28 нм FDSOI CMOS: 12,7 пДж/СОП при 0,55 В; оценка для ПЛИС в литературе отсутствует. В настоящей работе полное ядро (256 нейронов, 64k синапсов) реализовано на ПЛИС Gowin GW5A-LV25 (табл. 2). Оценка через Gowin Power Analyzer при распознавании пятна и реалистичной AER-нагрузке ($V_{core} = 1V, V_{CCX} = 3.3V$, доля времени работы буферных элементов ввода/вывода ~ 12.5 %, соотношение времени работы элементов статической памяти в режимах чтения и записи – 80 % / 20 %, соответственно, составляет:

FPGA 22 нм: ~11 500 пДж/СОП → ≈ 1000× относительно ASIC.

Тем не менее, учитывая высокую стоимость изготовления заказной микросхемы, применение ПЛИС с нейроморфным ядром в задачах краевых вычислений, где энергопотребление не критично, остаётся оправданным.

Заключение

Представлено аппаратное исполнение импульсной нейронной сети с on-chip-обучением на нейроморфном ядре ODIN (256 LIF-нейронов, 64k 3-битных синапсов), реализованном на ПЛИС Tang Primer 25k.

Применена математическая модель пуассоновского частотного кодирования, связывающая интенсивность пикселя с вероятностью генерации импульса. Предложен четырёхфазный протокол формирования обучающей последовательности AER-событий с аналитически определяемыми параметрами каждой фазы.

Показано, что разреженность паттерна является критическим условием корректности SDSP-обучения и отсутствия ложных срабатываний нецелевых нейронов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации – государственное задание в области научной деятельности (125022802988-9) FSEE-2025-0005.

Список литературы

1. Frenkel C., Lefebvre M., Bol D. A 0.086-mm² 12.7-pJ/SOP 64k-synapse 256-neuron online-learning digital spiking neuromorphic processor in 28-nm CMOS // IEEE Trans. on Biomedical Circuits and Systems. 2019. Vol. 13. No. 1. P. 145–158.

2. Boahen K.A. Point-to-point connectivity between neuromorphic chips using address events // IEEE Trans. on Circuits and Systems II. 2000. Vol. 47. No. 5. P. 416–434.

3. Ponulak F., Kasinski A. Introduction to spiking neural networks: Information processing, learning and applications // Acta Neurobiologiae Experimentalis. 2011. Vol. 71. No. 4. P. 409–433.

4. Guo W, Fouda ME, Eltawil AM and Salama KN (2021) Neural Coding in Spiking Neural Networks: A Comparative Study for Robust Neuromorphic Systems. Front. Neurosci. 15:638474. doi: 10.3389/fnins.2021.638474.

Д.А. КОНСТАНТИНОВА, К.А. ГАРАМОВ, С.А. ЛОБОВ
Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет), Долгопрудный
konstantinova.da@phystech.edu

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОТОКОЛОВ КОДИРОВАНИЯ В ИМПУЛЬСНОМ НЕЙРОНЕ С ПЛАСТИЧНОСТЬЮ STRDP

Импульсные нейронные сети – класс нейроморфных систем, где информация кодируется спайками. В работе исследованы протоколы кодирования в одиночном нейроне, обучаемом по правилу STRDP. Первый обучает нейрон при частотном кодировании и тестирует при временном на задаче различения знакомого паттерна. Второй реализует гибридное кодирование: стимул одновременно задан частотой и латентностью первого спайка. Показано, что достигается показатель различения 0,76 при смене кодирования, а вариация временного окна порождает различные профили весов.

Ключевые слова: *импульсные нейронные сети, нейронное кодирование, частотное кодирование, временное кодирование, STRDP, гибридное кодирование, синаптическая пластичность.*

Введение

Импульсные нейронные сети (ИНС) – класс нейроморфных систем, в которых информация кодируется дискретными во времени спайками. В отличие от искусственных сетей с непрерывными активациями, ИНС ближе к биологическим принципам обработки информации [1]. Ключевой механизм – нейронное кодирование. Выделяют два подхода: частотное (информация – средняя частота спайков за интервал) и временное (информация – момент спайка, например латентность первого) [2]. Отметим, что частотное кодирование реализуемо как во временном (усреднение по окну на одном синапсе), так и в пространственном (доля активных нейронов популяции за такт) вариантах [3]; мы используем временной, так как на каждое входное измерение приходится один выделенный синапс.

Частотное кодирование устойчиво, но отбрасывает временную структуру входа [4, 1]. Временное обладает большей информационной ёмкостью, что показано для сенсорных путей [5, 6, 7, 8] и позволяет обучать ИНС градиентно [9], но сопряжено с трудностями: чувствительностью к шуму, снижаемой синхронизацией спайков [10], сложностью использования локальной активности [11] и проблемой «мёртвых нейронов» в схемах

TTFS [12] – когда нейрон не достигает порога до конца окна кодирования, не выдаёт спайка и исключается из передачи информации, что может останавливать обучение единицы.

Для преодоления этих ограничений развивается гибридное (мультиплексное) кодирование [2, 13]. Биологические системы гибко сочетают обе схемы, формируя мультиплексные коды [14, 15]. Показано улучшение точности классификации за счёт интеграции нескольких схем кодирования [12] и снижение энергопотребления [16]. На аппаратном уровне предложены искусственный зрительный нейрон с мультиплексным rate-TTFS кодированием [17] и многосинаптический нейрон, кодирующий интенсивность и динамику [18]; конкурентное обучение при обоих кодированиях продемонстрировано в [19]. Цель работы – исследовать обучение одиночного нейрона по правилу STRDP [20, 21] при разных схемах кодирования: (1) способен ли нейрон, обученный при частотном кодировании, распознавать паттерны при временном, и (2) как ведёт себя гибридное кодирование. Схема намеренно минимальна – один постсинаптический нейрон и $N = 10$ афферентов, – чтобы изолировать механизм пластичности от эффектов сетевого уровня; обобщение на многонейронные архитектуры вынесено в заключение.

Модель нейрона и архитектура сети

Используется модель Ижикевича [22] – двумерная аппроксимация реалистичной импульсной динамики с существенно меньшими затратами, чем модели проводимостного типа (Ходжкина–Хаксли), и с более богатым репертуаром режимов, чем у LIF. Отметим, что в прикладных и крупномасштабных системах чаще используют LIF, а модель Ижикевича применяют преимущественно в исследованиях (в т.ч. аппаратных, например ODIN); её выбор здесь мотивирован сохранением богатой динамики одиночного нейрона:

$$\frac{dv}{dt} = 0{,}04v^2 + 5v + 140 - u + I, \tag{1}$$

$$\frac{du}{dt} = a(bv - u), \tag{2}$$

с условием сброса: если $v \geq 30$ мВ, то $v \leftarrow c$ и $u \leftarrow u + d$, где v – мембранный потенциал, u – восстановительная переменная, I – суммарный входной ток, a, b, c, d – безразмерные параметры. Используются значения для регулярно-спайкующих корковых нейронов [22]: $a = 0{,}02$,

$b = 0{,}2, c = -65$ мВ, $d = 8$; потенциал покоя $v = -70$ мВ, шаг интегрирования $\Delta t = 0{,}4$ мс. Расчёты выполнены в среде MATLAB с явным интегрированием уравнений (1)–(2) методом Эйлера.

Сеть состоит из одного постсинаптического нейрона i, связанного с $N = 10$ пресинаптическими нейронами j. Каждому j сопоставлены интенсивность $x_j \in [0, 1]$ и вес W_{ij}, изменяемый по STRDP. Синаптический сигнал:

$$\frac{dy_j}{dt} = -\frac{y_j}{\tau_I} + \delta\left(t - t_j^{pre}\right), \tag{3}$$

где $\tau_I = 10$ мс, t_j^{pre} – моменты спайков нейрона j; при каждом спайке y_j увеличивается на единицу и экспоненциально затухает. Суммарный входной ток:

$$I(t) = A \cdot \sum_{j=1}^{N} W_{ij} y_j(t), \tag{4}$$

где A – масштабирующий коэффициент.

Поскольку сеть не имеет скрытого слоя и содержит один выход, задача – не многоклассовая классификация, а различение знакомого/незнакомого паттерна (детекция новизны) с одним обученным образцом. Стимул – вектор $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_{10})$, $x_j \in [0{,}1;\ 1]$. При обучении многократно предъявляется один фиксированный знакомый паттерн $\mathbf{x}^*$, и STRDP настраивает W_{ij} на это распределение интенсивностей по синапсам. При тесте предъявляются $\mathbf{x}^*$ и 10 отрицательных примеров – случайных перестановок $\mathbf{x}^*$ по синапсам. Перестановка сохраняет то же мультимножество значений, поэтому суммарный вход сопоставим; различается лишь привязка интенсивности к синапсу. Показатель (11) характеризует настроенность синапс-специфичного профиля весов на пространственную конфигурацию паттерна, а не точность классификации.

Правило обучения STRDP

STRDP сочетает долговременную потенциацию (LTP) и депрессию (LTD) в зависимости от относительного времени пре- и постсинаптических спайков: ранние пресинаптические спайки усиливают связь, поздние — ослабляют [20]. Обновление происходит при спайке нейрона i; для каждого синапса вычисляется

$$\Delta t_{ij} = t_i - t_j^{pre}, \tag{5}$$

где t_i – время текущего постсинаптического спайка, t_j^{pre} – время последнего спайка нейрона j.

Если пресинаптический спайк предшествует постсинаптическому ($\Delta t_{ij} > 0$), изменение положительно (LTP):

$$\Delta W_{ij}^{+} = \eta \cdot exp(-\frac{\Delta t_{ij}}{\tau_p}) \cdot (1 - W_{ij}), \quad (6)$$

где η – скорость обучения, τ_p – постоянная потенциации, а $(1 - W_{ij})$ реализует мягкое ограничение весов. Если пресинаптический спайк следует за постсинаптическим, активируется депрессия (LTD):

$$\Delta W_{ij}^{-} = -\eta \cdot \alpha \cdot \frac{1}{1 + exp\left(\frac{b_d - \Delta t_{ij}}{\tau_d}\right)} \cdot W_{ij}, \quad (7)$$

где α – коэффициент депрессии, τ_d – постоянная депрессии, b_d – смещение центра сигмоиды. Совместное обновление:

$$W_{ij} \leftarrow W_{ij} + \Delta W_{ij}^{+} + \Delta W_{ij}^{-}. \quad (8)$$

Параметры во всех экспериментах:

$$\eta = 0{,}01, \tau_p = 10 \text{ мс}, \tau_d = 10 \text{ мс}, b_d = 95 \text{ мс}, \alpha = 0{,}3;$$

начальные веса равномерны на $[0, 1]$. Правило улавливает и структуру временных корреляций (ядро LTP), и частотно-зависимую модуляцию (член LTD), что удобно для разных парадигм кодирования.

Протокол 1: обучение при частотном кодировании, тест при временном. Обучение. Знакомый паттерн **x*** кодируется спайками, средняя частота которых пропорциональна интенсивности; моменты порождаются однородным пуассоновским процессом:

$$f_j = F_{max} \cdot x_j, \quad (9)$$

где $x_j \in [0{,}1;\ 1], F_{max} = 50$ Гц. Обучение – 1000 с; эта длительность выбрана как минимальная, при которой профиль весов, формируемый STRDP, стабилизируется (насыщение W_{ij}).

Тест. Используется латентность первого спайка (TTFS):

$$\Delta t_j = D_{max} \cdot (1 - x_j), \quad (10)$$

где $Dmax$ = 40 мс; сильные стимулы дают ранние спайки, слабые – поздние. В каждом окне 100 мс генерируется серия спайков. Тест – по 20 с для 11 условий: знакомый **x*** и 10 его случайных перестановок.

Метрика. Обозначим среднюю частоту постсинаптических спайков на знакомом паттерне f_{known}, на перестановках – $f_{unknown}$. Показатель различения

$$A_{accuracy} = \frac{f_{known}}{f_{known} + f_{unknown}}. \quad (11)$$

Значение выше 0,5 означает более сильный отклик на знакомую конфигурацию. Термин «точность» здесь не в классическом смысле многоклассовой классификации: имеется один обученный класс, тестируемый против перестановок самого себя.

Протокол 2: гибридное (смешанное) кодирование. Стимул представлен как:

$$s = (f, \tau), \quad (12)$$

где f – вектор средних частот, τ – вектор латентностей первого спайка. В отличие от Протокола 1 (раздельные фазы), здесь обе величины кодируются одновременно в каждом окне: частотная сигнатура – через межспайковый интервал (15), латентная – через момент первого спайка (14). Относительное влияние компонент управляется только параметрами $window$ и $rest_time$ без изменения правила пластичности; это центральная манипуляция протокола. Длительность обучения – 1000 с (как в протоколе 1) для каждой из трёх конфигураций.

Частотная компонента. Для каждого входного сигнала x_j вычисляется индивидуальная средняя частота спайков:

$$f_j = F_{max} \cdot x_j, \quad (13)$$

где $Fmax$ – максимально допустимая средняя частота. Моменты генерации спайков внутри каждого временного окна определяются пуассоновским процессом со средней интенсивностью f_j.

Временная компонента (TTFS). Для каждого нейрона вычисляется латентный период первого спайка, обратно пропорциональный интенсивности стимула:

$$\Delta t_j = D_{max} \cdot (1 - x_j), \quad (14)$$

где D_{max}– максимально возможная задержка.

Моделирование ведётся окнами длительности $window$, разделёнными $rest_time$. Внутри каждого окна генерируется последовательность спайков со средним межспайковым интервалом:

$$T_j = \frac{1000}{f_j} \text{ мс.} \quad (15)$$

Первый спайк окна – в момент Δt_j, последующие – с интервалом T_j. Так одновременно кодируются интенсивность (частота) и динамика (латентность). При малом $window$ относительно D_{max} после латентности помещается мало частотных спайков, и паттерн несёт почти только Δt_j; при большом – доминирует средняя частота Δt_j.

Исследованы три конфигурации:

1) временно-доминантная ($window = 40$ мс, $rest_time = 39$ мс),

2) частотно-доминантная ($window = 1000$ мс, $rest_time = 70$ мс),

3) переходная ($window = 400$ мс, $rest_time = 150$ мс);

во всех $F_{max} = 35$ Гц, $D_{max} = 30$ мс. Они выбраны для иллюстрации качественно различных режимов, а не плотного количественного сканирования; систематическая оценка показателя различения как функции $window/rest_time$ в работе не проводилась и вынесена в дальнейшую работу.

Результаты

Протокол 1: кросс-кодовое обобщение. Распределение весов после обучения при частотном кодировании и теста при временном показано на рис. 1: синаптическая эффективность растёт с интенсивностью и насыщается при максимуме – профиль, характерный для частотного обучения (сильные стимулы дают более частые совпадения пре- и постсинаптической активности и усиление весов через LTP).

При тесте во временном кодировании получен показатель

$$A_{accuracy} \approx 0{,}76$$

между знакомым паттерном и его 10 перестановками. Это демонстрирует перенос выученных синапс-специфичных ассоциаций при смене типа кодирования; значение превышает случайный уровень 0,5, то есть структура весов сохраняет информацию о пространственном распределении интенсивностей, доступную и при декодировании по времени спайка.

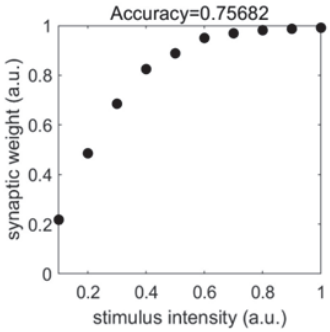


Рис. 1. Распределение синаптических весов в зависимости от интенсивности стимула после обучения при частотном кодировании (протокол 1). По горизонтали – нормированная интенсивность (усл. ед.), по вертикали – синаптический вес (усл. ед.). Показатель различения при TTFS $A_{accuracy} \approx 0{,}76$

Протокол 2: режимы гибридного кодирования. Распределения весов зависят от параметров, образуя три режима (рис. 2). Временно-доминантный (40/39 мс): при коротком окне доминирует TTFS, веса убывают с интенсивностью (сильные стимулы дают ранние первые спайки, узкое окно ограничивает число последующих спайков). Частотно-доминантный (1000/70 мс): при длинном окне доминирует частота, веса монотонно растут, воспроизводя профиль чистого частотного кодирования. Переходный (400/150 мс): промежуточная конфигурация даёт смешанную, немонотонную зависимость.

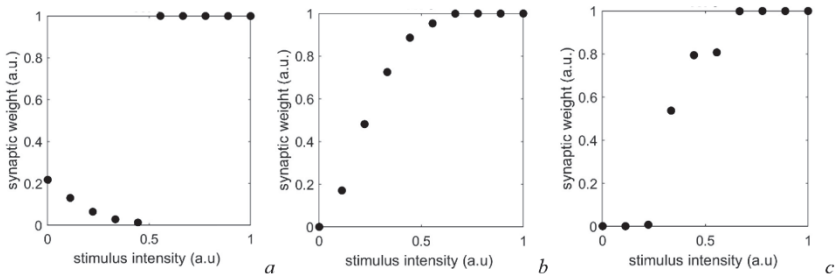


Рис. 2. Распределения синаптических весов в гибридном протоколе при $F_{max} = 35$ Гц и $D_{max} = 30$ мс: a) временно-доминантный, $window = 40$ мс, $rest_time = 39$ мс; b) частотно-доминантный, $window = 1000$ мс, $rest_time = 70$ мс; c) переходный, $window = 400$ мс, $rest_time = 150$ мс

Таким образом, варьированием $window$ и $rest_time$ можно управлять характером распределения весов, получая временные, частотные или переходные профили; количественное сопоставление параметров с показателем различения ещё предстоит установить.

Обсуждение

Протокол 1 показывает, что нейрон, обученный только частотному кодированию, приобретает структуру весов, поддерживающую различение при временном. Возможное альтернативное объяснение – что нейрон стал чувствителен лишь к суммарной интенсивности входа. Наша постановка частично снимает это: отрицательные примеры – случайные перестановки того же мультимножества интенсивностей, поэтому суммарный вход в знакомом и незнакомом условиях сопоставим, различается только привязка к синапсам. Так как веса синапс-специфичны, чисто амплитудный (перестановочно-инвариантный) механизм не должен давать $f_{known} > f_{unknown}$, что поддерживает интерпретацию 0,76 как чувствительности к пространственной конфигурации, а не к величине входа. Полностью исключить остаточный конфаунд нельзя (нелинейность STRDP, общие F_{max}/D_{max}); более чистой проверкой была бы контрольная серия с другим мультимножеством интенсивностей – это направление продолжения. Величина 0,76 (а не близкая к 1,0) отражает именно минимальный режим: один нейрон без латерального торможения, различение паттерна против его перестановок.

Протокол 2 показывает, что баланс временной и частотной компонент управляется параметрами окна и экспозиции без изменения правила пластичности, что важно для нейроморфных систем (баланс энергоэффективности, скорости, ёмкости и устойчивости к шуму); эта настраиваемость продемонстрирована качественно на трёх конфигурациях. Правило STRDP, сочетая экспоненциальное ядро LTP и сигмоидальный член LTD, естественно связывает временну́ю и частотную обработку; это удобно для гибридных условий, возможно, за счёт высокой размерности нейрона с множеством афферентов [23], и согласуется с работами по мультиплексному кодированию в искусственных нейронах [17, 18].

Ограничения. Эксперименты выполнены на одном нейроне с $N = 10$ входами, в протоколе 2 – на трёх конфигурациях; этого достаточно для качественной характеризации STRDP, но не для сильных обобщений о кодировании на уровне сети или популяции – выводы следует рассматривать как результаты уровня отдельного нейрона, требующие проверки на многонейронных архитектурах с латеральными взаимодействи-

ями (ср. [19]). Показатель (11) основан на одном паттерне против его перестановок, а не на многоклассовой классификации; для протокола 2 отсутствует количественная кривая «точность–параметры». Оба пункта – естественные следующие шаги.

Заключение

Исследованы два протокола кодирования для одиночного импульсного нейрона с пластичностью STRDP. Нейрон, обученный при частотном кодировании, различает обученный паттерн и его перестановки с показателем около 0,76 при тесте во временном кодировании, демонстрируя кросс-кодовое обобщение на уровне нейрона (с оговорками об интерпретации). Гибридный протокол позволяет качественно управлять профилем весов вариацией $window$ и $rest_time$: короткие окна дают временно-доминантные профили, длинные – частотно-доминантные, промежуточные – переходные. Результаты иллюстрируют универсальность STRDP в единой схеме на уровне нейрона; распространение до гипотезы единого механизма на уровне сети предстоит проверить на бóльших архитектурах. Дальнейшая работа: многонейронные архитектуры с конкурентными взаимодействиями, устойчивость к шуму, количественная зависимость показателя от $window/rest_time$, контроли с согласованным мультимножеством интенсивностей и эталонные задачи распознавания с несколькими классами.

Список литературы

1. Gerstner W., Kreiter A., Markram H., Herz A. Neural codes: firing rates and beyond // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 1997. Vol. 94. P. 12740–12741.
2. Cariani P., Baker J.M. Survey of temporal coding of sensory information // J. Neurosci. Methods. 2022. Vol. 375. 109595.
3. Schmutz V., Brea J., Gerstner W. Emergent rate-based dynamics in duplicate-free populations of spiking neurons // arXiv:2303.05174. 2023.
4. Wang Z. et al. Activeness: A novel neural coding scheme integrating the spike rate and temporal information in the spiking neural network // Electronics. 2023. Vol. 12. No. 10. 2157.
5. Di Lorenzo P.M., Victor J.D. Spike Timing: Mechanisms and Function. Boca Raton: CRC Press, 2013.
6. Carr C.E., Konishi M. A circuit for detection of interaural time differences in the brain stem of the barn owl // J. Neurosci. 1990. Vol. 10. No. 10. P. 3227–3246.
7. Johansson R.S., Birznieks I. First spikes in ensembles of human tactile afferents code complex spatial fingertip events // Nat. Neurosci. 2004. Vol. 7. No. 2. P. 170–177.
8. Victor J.D. How the brain uses time to represent and process visual information // Brain Res. 2000. Vol. 886. No. 1–2. P. 33–46.

9. Mostafa H. Supervised learning based on temporal coding in spiking neural networks // IEEE Trans. Neural Netw. Learn. Syst. 2018. Vol. 29. No. 7. P. 3227–3235.

10. Garamov K.A., Lobov S.A. Learning to Synchronize: A Delay-Based Plasticity Rule for Temporal Coding in Spiking Networks // Chaos, Solitons & Fractals. 2026. Vol. 208. 118199.

11. Wu J. et al. Spatio-temporal backpropagation for training high-performance spiking neural networks // Front. Neurosci. 2018. Vol. 12. 331.

12. Chen X., Yang Q., Wu J., Li H., Tan K.C. A hybrid neural coding approach for pattern recognition with spiking neural networks // arXiv:2305.16594. 2023.

13. Zheng H., Yi Y. Spiking neural encoding schemes and STDP training algorithms for edge computing // IEEE/ACM Symposium on Edge Computing (SEC). 2023. P. 327–332.

14. Herzfeld D.J. et al. Multiplexed coding by cerebellar Purkinje neurons // eLife. 2016. Vol. 5. e13810.

15. Lankarany M. et al. Differentially synchronized spiking enables multiplexed neural coding // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2019. Vol. 116. No. 20. P. 10097–10102.

16. Zhao Z. et al. A framework for the general design and computation of hybrid neural networks // Nat. Commun. 2022. Vol. 13. 3427.

17. Li S. et al. An artificial visual neuron with multiplexed rate and time-to-first-spike coding // Nat. Commun. 2024. Vol. 15. 1257.

18. Fan J. et al. A multisynaptic spiking neuron for simultaneously encoding spatiotemporal dynamics // Front. Neurosci. 2025. Vol. 19. 1523456.

19. Lobov S.A. et al. Competitive learning in a spiking neural network: towards an intelligent pattern classifier // Sensors. 2020. Vol. 20. No. 2. 500.

20. Lobov S.A., Makarov V.A. STRDP: A simple rule of rate dependent STDP // Proceedings of the 2023 7th Scientific School Dynamics of Complex Networks and their Applications (DCNA). 2023. P. 174–177.

21. Lobov S.A., Makarov V.A. Does Spike Firing Rate Dependence Imply Rate Coding? // Proceedings of the 2025 Seventh International Conference Neurotechnologies and Neurointerfaces (CNN). 2025. P. 48–51.

22. Izhikevich E.M. Simple model of spiking neurons // IEEE Trans. Neural Netw. 2003. Vol. 14. No. 6. P. 1569–1572.

23. Makarov V.A., Lobov S.A. Blessing of Dimensionality in Spiking Neural Networks: The by-Chance Functional Learning // Front. Appl. Math. Stat. 2025. Vol. 11.

М.С. ТАРКОВ
Институт физики полупроводников СО РАН им. А.В. Ржанова,
Новосибирский государственный университет
tarkov@isp.nsc.ru

ВЫЧИСЛЕНИЯ В ФИЗИЧЕСКИХ РЕЗЕРВУАРАХ НА ОСНОВЕ МЕМРИСТОРОВ: КРАТКИЙ ОБЗОР

Физические резервуарные вычисления – это форма нейроморфных вычислений, использующая динамические свойства материалов для высокопроизводительных вычислений. Для реализации этого подхода может использоваться широкий спектр физических систем, включая электронные, оптические и механические устройства. Цель данной работы – представить последние достижения в области физических резервуарных вычислений, с использованием новых электронных устройств – мемристоров. Обсуждаются архитектуры резервуаров в виде мемристорных сетей и мемристорных массивов.

Ключевые слова: *резервуарные вычисления, мемристор, мемристорные сети, мемристорные массивы, распознавание произнесенных цифр.*

Введение

Объем данных временных рядов значительно вырос благодаря быстрому расширению числа датчиков, интегрированных в периферийные устройства Интернета вещей (IoT). Поэтому возросла потребность в энергоэффективной обработке данных. Резервуарные вычисления (РВ) [1] предлагают нейроморфную структуру, которая особенно эффективна для обработки пространственно-временных сигналов. РВ значительно снижают затраты на обучение по сравнению с традиционными рекуррентными нейронными сетями. Главным достоинством их аппаратной реализации является возможность генерации динамических состояний резервуара. Устройства на основе мемристоров [2–9] служат для создания физических резервуаров, динамика которых может демонстрировать присущую им нелинейность, а их сопротивление может изменяться со временем в зависимости от истории приложенного напряжения. Нелинейность мемристора и зависимый от истории отклик позволяют решать линейно неразделимые задачи с данными временных рядов.

1. Резервуарные сети. Модель сети эхо-состояний

ESN (echo state network) [1] – это эффективный вариант резервуарной нейронной сети. Классическая модель ESN состоит из трех частей: входного слоя, скрытого слоя и выходного слоя. Скрытый слой содержит большое количество слабо связанных нейронов и называется резервуаром. Во время обучения ESN необходимо обучать только веса от резервуара к выходному слою. Входные веса сети и внутренние веса резервуара остаются неизменными после случайной инициализации, что значительно снижает вычислительные затраты сети.

Пусть U, N и Y обозначают количество нейронов во входном слое, резервуаре и выходном слое соответственно, а уравнение обновления состояния ESN может быть представлено следующим образом:

$$X(t) = f(W_{in}u(t) + W_{res}X(t-1)), \quad (1)$$

где $u(t) \in R_u$ обозначает входной вектор в момент времени t, $X(t) \in R_N$ обозначает состояние резервуара в момент времени t, $W_{in} \in R^{R\times U}$ – матрица входных весов резервуара, $W_{res} \in R^{N\times N}$ – матрица весов внутренних связей резервуара, и f – функция активации, которая обычно представляет собой сигмоидную функцию tanh. W_{in} – это случайно сгенерированная матрица, значения которой выбираются из равномерного распределения на $[-IS, IS]$, где IS – масштабный коэффициент входного сигнала.

Выходное уравнение ESN может быть представлено как:

$$Y_{pred} = W_{out}X, \quad (2)$$

где $Y_{pred}(t) \in R^Y$ – выходное значение в момент времени t, а $W_{out} \in R^{Y\times N}$ – матрица выходных весов от резервуара к выходу, обучение которой решает задачу линейной регрессии. После получения состояния резервуара X обучается матрица W_{out} и решается задача линейной регрессии в уравнении (2).

Предположим, что набор данных содержит *num* данных, разделенных на c категорий, каждая длиной l. Целевая матрица регрессии Y_{target} – это матрица, состоящая из *num* частей целевой матрицы, соответствующих i-му элементу данных. Если i-й элемент данных принадлежит классу c_i, то i-я строка содержит все 1, а остальные строки содержат все 0. Все $Y^i{}_{target}$ объединяются для получения целевой матрицы регрессии Y_{target}. Метод гребневой регрессии позволяет получить модель со следующей формулой:

$$W_{out} = Y_{target} X^T (XX^T + \lambda I)^{-1}, \quad (3)$$

где λ – коэффициент регуляризации, а I – единичная матрица. Y_{pred} – матрица, где каждый *l*-й столбец соответствует одному элементу данных. Для матрицы $Y^i{}_{pred}$, соответствующей *i*-му элементу данных, берется номер строки, соответствующий максимальному значению в каждом столбце, и вычисляется количество повторений каждого имени строки. Имя строки c_i с наибольшим количеством повторений во всех l столбцах является результатом классификации для этих данных. Если оно соответствует категории истинных данных, количество правильных классификаций *true* увеличивается на 1.

Точность классификации *acc = true/num* оценивается на тестовом наборе. В ESN основная роль резервуара заключается в выполнении нелинейных преобразований для отображения входных данных в многомерное пространство. Он действует как динамическая память и фиксирует временные зависимости во входных данных. Нейроны в резервуаре могут демонстрировать сложную динамику, что помогает улавливать временные закономерности во входных данных. Как наиболее важная часть сети, качество резервуара напрямую влияет на качество всей модели.

2. Модели мемристоров. Модель линейного ионного дрейфа

В последние годы было разработано множество математических моделей мемристоров. Модель линейного ионного дрейфа HP [3] – это самая первая разработанная модель мемристора. Моделируемый ею мемристор представляет собой слой оксида титана TiO_2, расположенный между двумя электродами. В мемристоре создается граница между обедненным кислородом и не обедненным кислородом оксидами. Общая толщина слоя оксида титана составляет D, а толщина обедненной кислородом части слоя w. При прохождении тока через мемристор граница между обедненным и необедненным оксидами начинает смещаться из-за движения заряда, тем самым изменяя общее сопротивление мемристора. Ток $i(t)$ в момент времени *t* выражен через напряжение $v(t)$ следующим образом:

$$i(t) = (R_{ON} \frac{w(t)}{D} + R_{OFF}(1 - \frac{w(t)}{D}))^{-1} v(t).$$

Здесь R_{ON} – минимальное сопротивление мемристора, достижимое, когда весь оксид мемристора переходит в обедненное состояние $(w(t) = D)$, R_{OFF} – максимальное сопротивление, при котором оксид титана не остается обедненным ($w(t) = 0$).

3. Мемристорные сети

Мемристорные резервуары можно условно разделить на два типа: мемристорные сети [5–6] и мемристорные массивы [7–9]. Мемристорные сети используют сложное динамическое поведение взаимодействующих мемристоров в качестве состояния резервуара, в то время как мемристорные массивы используют набор нелинейных откликов независимых мемристоров с дополнительными петлями обратной связи с задержкой.

Мемристорные резервуары сетевого типа сложнее в проектировании и управлении, чем резервуары массивного типа. В то же время мемристорный резервуар сетевого типа является привлекательным вариантом для аппаратной реализации, поскольку количество возможных сетевых структур, производящих различные динамические отклики на входные сигналы, может быть значительно увеличено за счет масштабирования размера сети. Это структурное разнообразие является основным преимуществом сетевого резервуара по сравнению с резервуарами массивного типа.

Физическая система резервуара с мемристорной сетью показана на рисунке 1 и состоит из секции предварительной обработки, секции ввода, секции резервуара и секции считывания. Сначала данные временного ряда преобразуются в сигнал напряжения на этапе предварительной обработки, например, путем соответствующего масштабирования и маскирования, в зависимости от типа данных. Затем этот сигнал напряжения подается на резервуар на основе мемристорной сети. Динамический отклик резервуара на входной сигнал получается, как временная эволюция электрических токов, протекающих через отдельные мемристоры.

В секции считывания сигналы тока преобразуются в матрицу с использованием набора состояний резервуара и необязательного этапа постобработки, а затем используются для получения выходного сигнала системы. Обучаемой является только матрица весов выходного сигнала W_{out}. Мы рассматриваем общую сеть мемристоров, состоящую из N_{m} мемристоров, N_{n} узлов сети и N_{i} источников напряжения. Рассматривая узлы сети как вершины, а ветви мемристоров как ребра, связность мемристоров может быть

представлена в виде ориентированного графа, описываемого матрицей инцидентности. Связность источников напряжения может быть аналогично описана матрицей инцидентности.

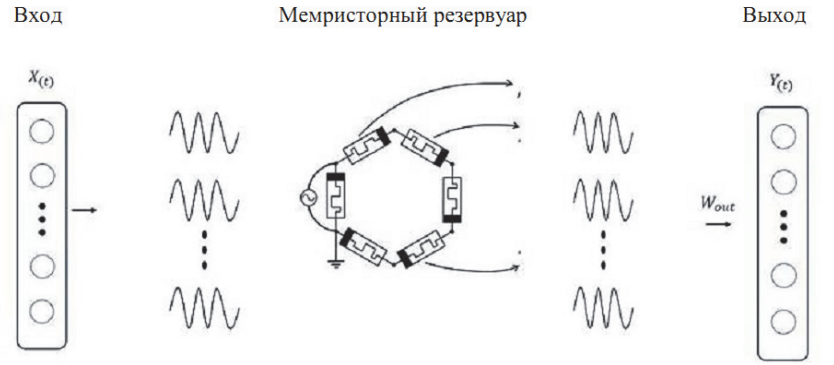


Рис. 1. Резервуарная система с мемристорной сетью

Мемристоры в резервуаре сети описываются линейной дрейфовой моделью HP. Сам мемристор не имеет положительного или отрицательного полюса, но поскольку его сопротивление зависит от количества протекающего через него заряда, различные формы подключения будут влиять на изменение его сопротивления. Можно считать один конец легированной области положительным полюсом, а конец нелегированной области – отрицательным полюсом.

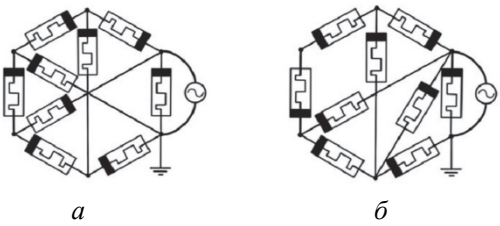


Рис. 2. Структура мемристорной сети: а) SP-сеть, б) RP-сеть

Можно описать мемристорные сети с различными сетевыми структурами. Имея число мемристоров m и число узлов цепи n, сначала создается кольцевая сеть с мемристорами, а затем мемристоры добавляются между узлами кольцевой сети. Поскольку изменение сопротивления мемристора

зависит от полярности приложенного напряжения, рассматриваются два случая: в первом типе сети все мемристоры питаются напряжением одинаковой полярности (SP-сеть), тогда как во втором типе сети полярность напряжения на мемристорах случайная (RP-сеть), рис. 2.

Общие уравнения цепи мемристорной сети, основанные на новом модифицированном методе узлового анализа, классифицируются как дифференциально-алгебраическая система уравнений (ДАУ). На платформе моделирования MATLAB эти уравнения решаются с помощью решателя ДАУ [5]. Динамическое состояние резервуара представляется временным рядом вектора электрических токов, протекающих через мемристоры. Состояния резервуара используются для генерации выходных данных системы в процессе считывания.

4. Мемристорные массивы. Модель динамического мемристора

Требование описания быстрой нелинейной динамики и затухания устройства, позволяющего нелинейно преобразовывать сигнал временного ряда в новое случайное многомерное пространство характеристик привело к разработке новой модели, которая соответствует наблюдаемому поведению динамических (энергозависимых) мемристорных устройств [9]. Под воздействием импульса напряжения динамический мемристор демонстрирует переходный отклик за счет временных изменений проводимости, а затем быстро и нелинейно затухает почти до своего исходного состояния на основе спонтанных физических эффектов.

Для реализации характеристик резервуара динамического мемристора его кратковременная динамика моделировалась с использованием зависящих от времени состояний $I(t)$ резервуара [9]:

$$I(t) = I(t-1) + \Delta I(t-1),$$

где, в зависимости от наличия или отсутствия входного импульса на временном шаге $(t-1)$, соответственно,

$$\Delta I(t-1) = a + b \cdot \exp(-c\frac{I(t-1) - I_{OFF}}{I_{ON} - I_{OFF}})$$

или

$$\Delta I(t-1) = d + f \cdot \exp(-g\frac{I_{ON} - I(t-1)}{I_{ON} - I_{OFF}}).$$

Здесь *a, b, c, d, f , g* – параметры.

Если подавать несколько импульсов с короткими интервалами, отклик будет постепенно увеличиваться, демонстрируя эффект накопления. Если имеется достаточно длительный период без какого-либо воздействия, то состояние устройства будет затухать в направлении исходного состояния покоя.

Нелинейные системы с запаздывающей обратной связью и/или связью с временной задержкой, часто называемые просто «системами задержки», представляют собой класс динамических систем, которые возникают в различных системах реального мира. Одна из простейших возможных систем задержки (рис. 3) состоит из одного нелинейного узла, динамика которого определяется его собственным выходным сигналом в момент времени $t-\tau$ в прошлом.

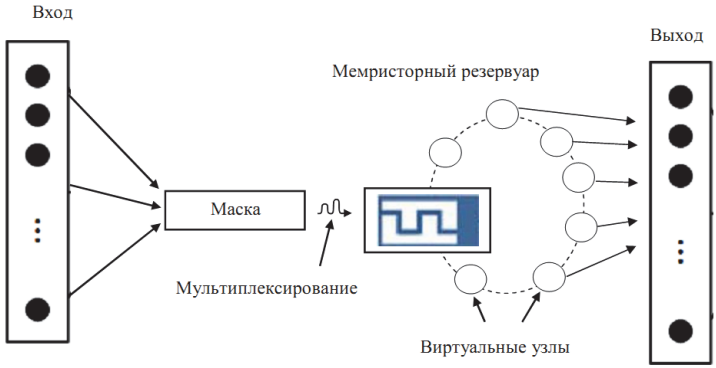


Рис. 3**.** Простейшая система задержки

Такая система включает в себя всего два элемента: нелинейный узел и петлю задержки. Богатые динамические свойства систем задержки могут быть эффективно использованы для обработки зависящих от времени сигналов путем соответствующей модификации концепции резервуарных вычислений. Такие задачи как распознавание речи [5, 8], могут быть успешно решены. Резервуарный компьютер может быть реализован в том случае, если традиционная структура из нескольких соединенных узлов заменена динамической системой, включающей нелинейный узел, подверженный задержке обратной связи.

Состояние системы с непрерывной задержкой в момент времени *t* зависит от выхода нелинейного узла в течение непрерывного временного ин-

тервала $[t-\tau, t]$, где τ – время задержки. Динамика системы с задержкой демонстрирует высокую размерность и свойства кратковременной памяти. Следовательно, системы с задержкой удовлетворяют требованиям резервуаров. Отличные результаты на тестовых задачах достигаются при адаптации парадигмы РВ к системам с задержкой.

В пределах одного интервала задержки длиной τ определены N равноудаленных точек, разделенных во времени интервалом $\theta = \tau / N$ и называемых «виртуальными узлами», поскольку они играют роль, аналогичную роли узлов в традиционном резервуаре. Значения переменной задержки в каждой из N точек определяют состояния виртуальных узлов. Таким образом, виртуальные узлы имитируют сеть, служащую резервуаром.

В [8] показано, что один нелинейный узел с задержкой обратной связи работает сопоставимо с традиционными резервуарами. Виртуальные узлы подвергаются воздействию входного потока, который может представлять собой изменяющуюся во времени скалярную переменную или вектор любой размерности. Данные подаются на отдельные виртуальные узлы путем сериализации входных данных с использованием временного мультиплексирования. Для этого входной поток подвергается операции выборки и удержания для определения потока $I(t)$, который остается постоянным в течение одного интервала задержки τ, прежде чем обновляться. Таким образом, вход резервуара всегда дискретизируется во времени.

Для определения весовых коэффициентов связи от потока $I(t)$ к виртуальным узлам вводится случайная матрица M, которая далее называется маской. Выполняя умножение $J(t_0) = M \times I(t_0)$ в заданный момент времени t_0, мы получаем N-мерный вектор $J(t_0)$, который представляет собой временную входную последовательность в интервале $[t_0, t_0 + \tau]$. На рисунке 3 указана описанная выше процедура подготовки и маскирования входных данных. Алгоритм обучения присваивает каждому виртуальному узлу выходной вес таким образом, чтобы сумма взвешенных состояний максимально точно аппроксимировала желаемое целевое значение.

Динамическая система РВ на основе мемристора [8] использует управляемый процесс маскирования для генерации состояний резервуара. Управляя параметрами в процессе маскирования, мы можем регулировать не только богатство состояний резервуара, но и силу обратной связи, которые являются критически важными свойствами, влияющими на производительность RC-системы.

Экспериментальные результаты показывают, что динамический выход мемристора зависит не только от входного тока, но и от истории входного сигнала. Эта кратковременная динамическая память мемристора позволяет

эквивалентно реализовать нейронную сеть с рекурсивными связями. Объединив нелинейность и кратковременную память устройства, мы получаем динамическую РВ-систему на основе мемристора.

Архитектура РВ-сети требует случайных соединений между несколькими устройствами, что сложно реализовать аппаратно. Эта проблема решается временным мультиплексированием и процессом маскирования для генерации виртуальных узлов во временной области. Из-за динамического и нелинейного отклика мемристора эти виртуальные узлы нелинейно связаны друг с другом.

Входной сигнал предварительно обрабатывается с помощью процедуры временного мультиплексирования, которая умножает входной сигнал на матрицу маски, а затем преобразует его в последовательность импульсов напряжения с помощью системы генерации сигналов. Каждый кадр входного сигнала может генерировать последовательность импульсов общей длиной τ. Предварительно обработанный входной сигнал подается на резервуар. Выходной вектор представляет собой линейную комбинацию состояний резервуара, а веса обучаются с помощью линейной регрессии.

Для достижения оптимальных результатов классификации используются несколько резервуаров [7, 8] параллельно, где маски (одномерные последовательности) отличаются друг от друга. При этом нелинейность динамического мемристора непосредственно используется в качестве функции активации. В каждом временном интервале τ выход системы RC представляет собой линейную комбинацию всех состояний резервуара, где веса обучаются с использованием простого метода линейной регрессии.

Показатель NRMSE (нормированная среднеквадратичная ошибка) при постоянном размере резервуара $M \times N = 40$ [8] (N – количество резервуаров, соединенных параллельно) становится высоким, когда длина маски M слишком велика или слишком мала, достигая минимального значения, когда длина маски составляет около 4. Для достижения наилучшего результата классификации необходимо тщательно регулировать длину маски, чтобы найти компромисс между силой обратной связи и богатством состояний.

Эксперимент показал, что оптимальная длина маски $M \approx 4$, что дает наименьшее значение NRMSE=0,14 [8]. Экспериментальные результаты показывают, что параллельная RC-система работает лучше, чем RC-система на основе одного мемристора при регулировании длины маски (например, N = 10 при M = 4), что не только увеличивает скорость системы, но и снижает частоту ошибок.

Были проведены численные эксперименты для оценки эффективности классификации RC-систем, состоящих из простых моделей мемристоров,

для задачи распознавания произнесенных цифр. Распознавание произнесенных цифр в резервуаре на основе сети мемристоров в среднем составляет 99,8 % точности по 10 различным сетям мемристоров [5]. Распознавание произнесенных цифр в резервуаре на основе независимых мемристоров достигает точности 99,6 % [8].

Заключение

В работе рассмотрено развитие физических резервуарных вычислений с использованием новых электронных устройств – мемристоров. Обсуждаются архитектуры резервуаров в виде мемристорных сетей и мемристорных массивов. Показано, что массивы мемристоров успешно конкурируют с сетями мемристоров при значительно меньших вычислительных затратах. Целью дальнейшей работы является исследование резервуарных сетей на основе массивов сегнетоэлектрических мемристоров.

Список литературы

1. Jaeger H. The «echo-state» approach to analysing and training recurrent neural networks // Technical Report 148, GMD – German National Research Institute for Computer Science, 2001.

2. Chua L. Memristor – The missing circuit element // IEEE Transactions on Circuit Theory. 1971. Vol. 18/ No. 5. P. 507–519.

3. Strukov D., Snider G., Stewart D., Williams S. The missing memristor found // Nature. 2008. Vol. 453. P. 80–83.

4. Biolek D., Biolkova V., Biolek Z. SPICE Model of Memristor with Nonlinear Dopant Drift // Radioengineering. 2009. Vol. 18. P. 210–214.

5. Tanaka G., Nakane R. Simulation platform for pattern recognition based on reservoir computing with memristor networks // Scientific Reports. 2022. Vol. 12. No. 1. P. 9868.

6. Tarkov M.S., Ma J. Signal Processing by A Reservoir Network on Memristors // Kryzhanovsky et al. (eds) Advances in Neural Computation, Machine Learning, and Cognitive Research IX. Selected Papers from the XXVII International Conference on Neuroinformatics, October 20–24, 2025, Moscow, Russia, Springer. P. 3–12. doi:10.1007/978-3-032-07690-8.

7. Singh A. et al. Analysis and fully memristor-based reservoir computing for temporal data classification // Neural Networks. 2025. Vol. 182, P. 1–13.

8. Zhong N. et al. Dynamic memristor-based reservoir computing for high-efficiency temporal signal processing // NATURE COMMUNICATIONS, 2021. https://doi.org/10.1038/s41467-020-20692-1.

9. Shin H. et al. Ferroelectric Charging Tunnel Junctions: Resolving Transport Trade-Offs via Trap-Assisted Barrier Modulation for Physical Reservoir Computing // Advanced Functional Materials, 2026. https://doi.org/10.1002/adfm.75198.

А.П. ДУДКИН, Е.А. РЫНДИН, Н.В. АНДРЕЕВА
Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)
anddudkin000@gmail.com

ОЦЕНКА ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНОСТИ ИМПУЛЬСНЫХ И ФОРМАЛЬНЫХ НЕЙРОСЕТЕЙ В ЦИФРОВОМ И АНАЛОГОВОМ АППАРАТНОМ ИСПОЛНЕНИИ

В работе проведена симуляция и сравнительная оценка аппаратного исполнения формальной и импульсной нейронных сетей на классической вычислительной архитектуре (с использованием среды архитектурного моделирования gem5) и в асинхронной аналоговой реализации (с использованием разработанного специализированного симулятора). Показано, что необходимым условием достижения высоких показателей производительности и энергоэффективности импульсных нейросетей является их аппаратное исполнение в виде асинхронных аналоговых архитектур.

Ключевые слова: *импульсные нейронные сети, аппаратное исполнение, мемристивный кроссбар-массив, среда архитектурного моделирования gem5.*

Введение

Энергоэффективность вычислений является одним из ключевых факторов при аппаратном исполнении нейросетевых моделей во встраиваемых (embedded) и периферийных (edge) системах. С увеличением объёма вычислений ключевыми факторами становятся не только процессорные операции, но и пропускная способность памяти, скорость передачи данных и архитектурные особенности вычислительной системы. Поэтому анализ и сравнение нейросетевых архитектур должны проводиться не только на алгоритмическом уровне, но и с учётом аппаратной реализации и свойственных ей ограничений.

Импульсные нейронные сети (ИмНС) рассматриваются как перспективная альтернатива формальным нейронным сетям за счет событийного характера обработки информации. Потенциальное преимущество ИмНС проявляется прежде всего в сценариях с высокой разрежённостью активности, где вычисления могут быть сокращены за счёт малого числа импульсов (спайков). Однако сравнение ИмНС с классическими нейросетями только по количеству выполняемых операций может оказаться недостаточным.

При учёте динамики и объемов перемещения данных, обращений к памяти, особенностей архитектуры нейросети и аппаратной платформы, потребляемая мощность и производительность ИмНС могут существенно варьироваться и не давать заметного преимущества в энергоэффективности.

Основной интерес представляют вычисления в памяти (in-memory) и аналоговые подходы к реализации нейроморфных вычислений. В работе [1], посвященной исследованию ИмНС и аналоговых вычислений в памяти, показано, что именно совмещение событийной обработки с аппаратными вычислениями на уровне мемристивных кроссбар-структур может дать серьезный выигрыш по энергопотреблению и производительности, особенно в энергоэффективных вычислениях на конечных устройствах (low-power edge computing). При этом подчеркивается необходимость системного анализа, учитывающего свойства алгоритма, ограничения аппаратного исполнения и особенности архитектуры [2].

В данной работе основное внимание уделяется анализу аналоговой модели импульсной нейросети с использованием разработанного специализированного симулятора [3], позволяющего детально оценить энергопотребление ключевых аппаратных компонентов в зависимости от варьируемых параметров архитектуры. Для обеспечения достоверности сравнительной оценки формальной и импульсной нейронных сетей, сравнение их исполнения выполнено в среде архитектурного моделирования gem5 [4] на одной классической вычислительной архитектуре, что позволяет получить оценку влияния конфигурации ядра и кэш-подсистемы на производительность и энергозатраты.

Целью работы является оценка аппаратной реализации аналоговых ИмНС для периферийных систем искусственного интеллекта по показателям производительности и энергоэффективности, их сравнение с формальными нейронными сетями, а также определение влияния особенностей архитектуры на энергопотребление и производительность при переходе от цифрового аппаратно-интегрального исполнения к аналоговому.

1. Материалы и методы

1.1. Программная симуляция формальной и импульсной нейросети

Для оценки вычислительной эффективности классической и импульсной нейросетей использовалась симуляция их исполнения на классической вычислительной системе в среде архитектурного моделирования gem5 с последующей оценкой энергопотребления по статистике функционирования с помощью программного инструмента McPAT [5]. В качестве базовой

конфигурации рассматривалась однопроцессорная embedded-ориентированная система с одним вычислительным RISC-V ядром с тактовой частотой 1 ГГц и кэш-подсистемой первого и второго уровней, включающей 32 Кб L1 кеш и 2 Мб L2 кеш (рис. 1). Такая конфигурация была выбрана как приближенная к вычислительному устройству HiFive Unmatched с процессором SiFive U74, и подходящая для анализа нейросетевых вычислений в условиях ограниченных ресурсов.

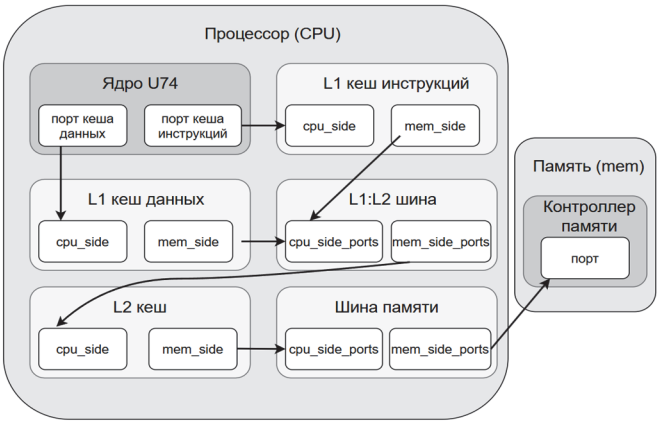


Рис.1. Микроархитектура цифровой вычислительной системы в gem5

В работе сравнивались модели формальной и импульсной нейронных сетей. Архитектура формальной нейросети – многослойный перцептрон с размерностью слоев 784×32×10. Архитектура импульсной нейросети – это однослойная сеть с размерностью 784×100. Одной из основных характеристик нейронных сетей является точность. Поэтому размерности анализируемых нейросетей были выбраны из условия обеспечения ими сопоставимых уровней точности с учетом особенностей их обучения. Исходный программный код для обеих моделей был написан на языке C++ и скомпилирован в исполняемый бинарный файл под RISC-V архитектуру.

Обе модели нейронных сетей решали задачу распознавания изображений рукописных цифр базы данных MNIST [6]. В случае формальной нейросети на входы подавались 8-битные коды яркости пикселей изображения, а для импульсной нейросети использовалось частотное кодирование, при котором частота импульсов постоянной амплитуды пропорциональна яркости пикселей. Для обучения формальной нейросети использовался метод пакетного градиентного спуска (batch gradient descent), а для

импульсной сети – обучение без учителя по правилу синаптической пластичности нейронов, зависящее от времени импульса (Spike-Timing Dependent Plasticity – STDP), в рамках которого весовые коэффициенты нейросети увеличивались или уменьшались в зависимости от времени пре- и постсинаптических импульсов. Такой выбор был сделан с целью получения сопоставимых оценок производительности и энергопотребления для режима инференса при исполнении на одной классической вычислительной архитектуре. Энергопотребление оценивалось по результатам симуляции разработанных моделей в gem5, после чего, с использованием специализированного инструмента McPAT [5], оценивалась средняя мощность с учетом используемой микроархитектурной конфигурации системы.

1.2. Аналоговая модель импульсной нейронной сети

Для оценки энергопотребления аналогового исполнения импульсной нейронной сети с учетом разреженности вычислений, когда в какой-либо момент времени задействована только часть функциональных элементов, необходимо рассчитать энергопотребление для каждого такого элемента. Основным функциональным блоком ИмНС является мемристивный кроссбар-массив, выполняющий операции матрично-векторного умножения (МВУ). Для одного элемента кроссбар-массива (мемристора или участка соединительной линии) энергия E_{ij}, потребляемая при поступлении одного импульса:

$$E_{ij} = I_{ij}^2 * R_{ij} * t_{imp}, \quad (1)$$

где I_{ij} – ток через элемент кроссбар-массива; R_{ij} – сопротивление элемента кроссбар-массива; t_{imp} – длительность импульса; i и j – индексы строки и столбца соответственно.

Тогда, суммарная энергия, потребляемая всеми мемристивными элементами кроссбар-массива размером m строк на n столбцов E_{mem}, а также суммарные энергии, приходящиеся на соединительные линии строк E_{WL} и столбцов E_{BL}, будут определяться следующими выражениями:

$$E_{mem} = t_{imp} * \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} I_{mem_{ij}}^2 * R_{mem_{ij}} \quad (2)$$

$$E_{WL} = t_{imp} * \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} I_{WL_{ij}}^2 * R_{WL_{ij}} \quad (3)$$

$$E_{BL} = t_{imp} * \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} I_{BL_{ij}}^2 * R_{BL_{ij}}, \quad (4)$$

где $R_{mem_{ij}}$, $R_{WL_{ij}}$, $R_{BL_{ij}}$ – сопротивления мемристивных элементов и соединительных линий столбцов и строк; $I_{mem_{ij}}$, $I_{WL_{ij}}$, $I_{BL_{ij}}$ – токи, протекающие через мемристивные элементы и соединительные линии столбцов и строк, соответственно.

В результате суммарная энергия E_{total} с учетом всех элементов кросс-бар-массива будет определяться следующим выражением:

$$E_{total} = E_{mem} + E_{WL} + E_{BL}. \quad (5)$$

Оценка энергопотребления нейрона выполнялась для КМОП LIF-нейрона, схема которого приведена на рис. 2 [7].

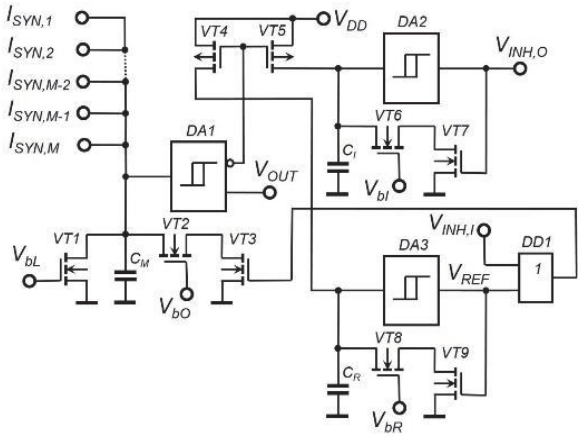


Рис. 2. Схема КМОП LIF-нейрона [7]

Данная схема реализует следующие функции: интегрирование входящих импульсов и накопление мембранного потенциала на конденсаторе C_M, утечка мембранного потенциала во времени через канал транзистора $VT1$, управляемого напряжением V_{bL}, задающим постоянную времени утечки, срабатывание нейрона с генерацией выходного импульса триггером Шмитта $DA1$ и сбросом мембранного потенциала, генерацию импульсов, длительность которых определяет периоды рефрактерности нейрона и латерального ингибирования нейронов окружения, триггерами Шмитта DA3 и DA2 с времязадающими цепями C_R, VT8, VT9 и C_I, VT6, VT7.

Средняя мощность P_{neuron}, потребляемая таким нейроном, будет определяться выражением:

$$P_{neuron} = \frac{P_{NW}\Delta t + P_{REF}T_{REF}}{\Delta t + T_{REF}} \quad (6)$$

где P_{NW} и P_{REF} – средняя мощность за период Δt накопления мембранного потенциала и за период рефрактерности, соответственно; T_{REF} – длительность периода рефрактерности.

Для мемристивных кроссбар-массивов, согласно последним исследованиям, необходимо проводить операцию коррекции весов из-за дрейфа состояний проводимости мемристоров во времени. Данная операция проводится один раз за фиксированный период времени, длительность которого, согласно исследованию [8], составляет около 30 минут и, таким образом, не оказывает существенного влияния на среднее энергопотребление.

Перечисленные выше функциональные блоки позволяют оценить энергопотребление ИмНС в инференс-режиме.

Разработанная аналоговая модель импульсной нейронной сети позволяет на основе программной симуляции получить в событийном формате количество операций, выполненных каждым из функциональных блоков, и оценить энергопотребление нейросети за время решения задачи.

Сравнение цифровых моделей проводилось по таким критериям, как время выполнения, средняя потребляемая мощность, общее энергопотребление и IPC (число инструкций за такт). При этом параметр IPC играл вспомогательную роль, позволяя оценить влияние микроархитектуры вычислительной системы. В качестве основного параметра выступала энергоэффективность, которая в контексте встраиваемых систем наиболее полно отвечала задачам исследования. В случае аналоговой модели нейросети ключевым результатом была зависимость потребляемой энергии от архитектурных параметров сети.

2. Результаты и обсуждение

В ходе моделирования в среде gem5, инференс импульсной нейронной сети (ИмНС) размерности 784×100 на тестовой выборке из 50 изображений в однопроцессорной конфигурации (ядро 1 ГГц, кэш L1, L2) продемонстрировал время выполнения 2,02 с. Средняя потребляемая мощность при этом составила 176 мВт, а суммарное энергопотребление — около 350 мДж, то есть 7 мДж на одно изображение. Значение IPC (инструкций за такт) находилось на уровне 0,85. Полученные результаты свидетельствуют о том, что

даже при относительно небольшой размерности сети исполнение импульсной модели на классической вычислительной архитектуре является энергозатратным вследствие необходимости воспроизведения дополнительных вычислительных операций: накопления мембранного потенциала, реализации механизмов утечки, рефрактерности и ингибирования.

С целью максимально объективного сравнения энергоэффективности в инференс-режиме, использованы предобученные формальная и импульсная сети с оптимизированными архитектурами и одинаковой точностью распознавания.

Для сравнения, при моделировании формальной нейросети в архитектуре перцептрона (784×32×10) на идентичной классической аппаратной конфигурации, время выполнения составило 80 мс при средней мощности 150 мВт, что соответствует энергии порядка 12 мДж (240 мкДж на одно изображение). Таким образом, цифровая реализация модели формальной нейронной сети обеспечивает в инференсе существенно более низкое энергопотребление по сравнению с импульсной моделью, что объясняется более простой вычислительной схемой и меньшим числом управляющих операций. Следовательно, результаты, полученные при симуляции аппаратного исполнения импульсной сети на классической вычислительной архитектуре, не следует рассматривать как прямой аналог показателей специализированной аппаратной реализации, поскольку последняя обладает принципиально иной архитектурой и, как следствие, энергоэффективностью.

Результаты моделирования аналогового исполнения ИмНС были получены с использованием специализированного симулятора, разработанного при выполнении данного исследования. Моделирование инференс-режима на аналогичной задаче распознавания изображений дало результат 7 мкДж на одно изображение, что примерно в 35 раз меньше, по сравнению с обработкой одного изображения формальной нейросетью (240 мкДж/изображение), и в 1000 раз меньше, по сравнению с исполнением ИмНС на классической вычислительной архитектуре.

Схожие результаты точности распознавания были получены для различных размеров ИмНС при соответствующей оптимизации гиперпараметров. Зависимость энергопотребления мемристивного кроссбар-массива и нейронов аналоговой ИмНС при размере изображений 28x28 пикселей (784 входные линии) от числа выходных нейронов представлена на рис. 3.

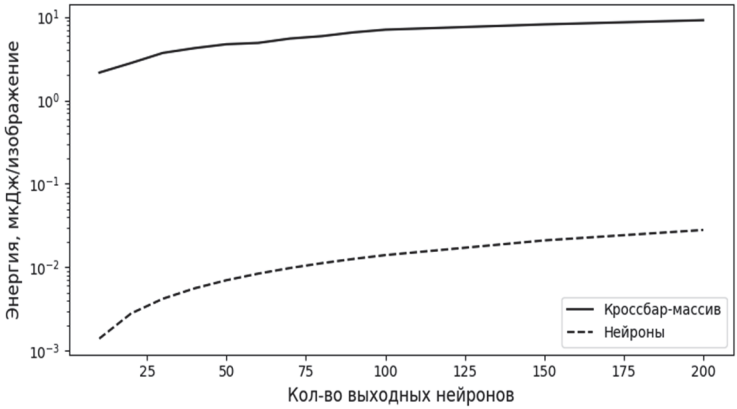


Рис. 3. Зависимость потребляемой энергии на одно изображение в зависимости от количества выходных нейронов

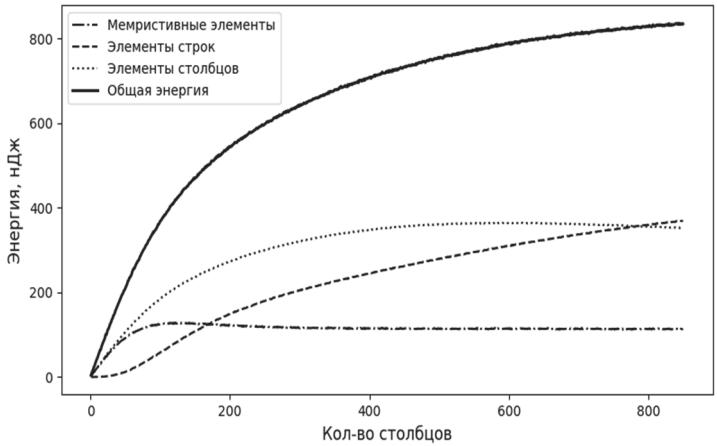


Рис. 4. Зависимости энергопотребления мемристивных структур и соединительных элементов столбцов и строк массива от количества столбцов при фиксированном количестве строк

Результаты моделирования демонстрируют, что в аналоговой модели основной вклад в энергопотребление формируется именно кроссбар-массивом, а не аналоговыми нейронами (< 1 %), и поэтому энергопотребление

системы определяется прежде всего размером матрицы, параметрами проводящих линий и числом одновременно поданных входных сигналов.

С учетом того, что основной вклад в энергопотребление нейросети вносит мемристивный кроссбар-массив, были получены отдельные зависимости энергопотребления мемристивных структур и соединительных элементов столбцов и строк массива от количества столбцов при фиксированном количестве строк (рис. 4) и при равном числе строк и столбцов (рис. 5). Среднее сопротивление мемристивных элементов составило 11 кОм (диапазон состояний от 1 кОм до 20 кОм), сопротивление участков соединительных линий – 1 Ом. На все входы мемристивного кроссбар-массива подвались импульсы входного напряжения амплитудой 0.6 В, что соответствует наихудшему случаю с точки зрения энергопотребления.

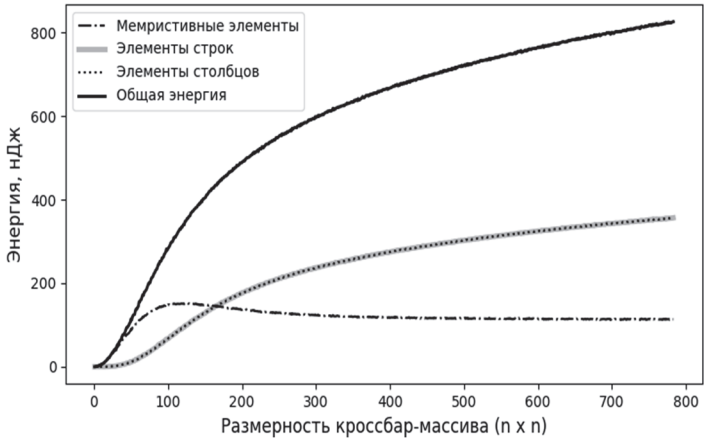


Рис. 5. Зависимость потребляемой энергии от размера мемристивного кроссбар-массива с одинаковым числом n строк и столбцов

В соответствии с полученными зависимостями, при равном числе строк и столбцов энергопотребление мемристивных элементов преобладает только до определенного размера кроссбар-массива (в рассматриваемом на рис. 5 случае – до размера 160x160). При увеличении размера массива сверх указанного, все более значительная часть входных напряжений начинает падать на элементах соединительных линий, что приводит к преобладанию энергопотребления соединительных линий и увеличению погрешности выполнения операций аналогового матрично-векторного умножения. При

сравнительно большом фиксированном числе строк (784 на рис. 4), суммарное энергопотребление элементов соединительных линий превышает энергопотребление мемристоров для любого числа столбцов массива.

Заключение

В работе проведен сравнительный анализ энергоэффективности формальной и импульсной нейронных сетей при их аппаратном исполнении на классической вычислительной системе и в асинхронной аналоговой архитектуре, с использованием среды архитектурного моделирования gem5 и разработанного специализированного симулятора.

Результаты моделирования показали, что при исполнении на классической вычислительной архитектуре, энергопотребление ИмНС, даже при относительно небольшой размерности, примерно в 29 раз превышает данный показатель формальной нейронной сети, вследствие необходимости воспроизведения вычислительных операций накопления мембранного потенциала, реализации механизмов утечки, рефрактерности и ингибирования.

Вместе с тем при аналоговом исполнении ИмНС на аналогичной задаче распознавания изображений энергопотребление составило 7 мкДж/изображение, что примерно в 35 раз меньше энергии, затрачиваемой формальной нейросетью, и в 1000 раз меньше, по сравнению с исполнением ИмНС на классической вычислительной архитектуре. При этом для аналогового аппаратного исполнения ИмНС основной вклад в энергопотребление (более 99 %) вносит мемристивный кроссбар-массив, а не нейроны, причем при превышении определенного размера кроссбар-массива потери энергии на соединительных линиях преобладают, увеличивая погрешность результатов выполнения матрично-векторного умножения.

Таким образом, необходимым условием достижения высоких показателей производительности и энергоэффективности импульсных нейронных сетей является их аппаратное исполнения в виде асинхронных аналоговых архитектур. При этом для снижения энергопотребления соединительных линий мемристивных кроссбар-массивов и уменьшения их влияния на результат аналогового МВУ, при разработке проектов аппаратного исполнения аналоговых нейронных сетей необходимо:

- учитывать сопротивления соединительных линий мемристивных кроссбар-массивов, границы диапазона резистивных состояний мемристоров и отношение сопротивления элементов соединений к среднему сопротивлению мемристивных структур;

- выбирать число слоев нейроморфной архитектуры с учетом допустимого для обеспечения требуемой вычислительной точности размера мемристивных кроссбар-массивов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации – государственное задание в области научной деятельности FSEE-2025-0005.

Список литературы

1. H. Ren et al. When Pipelined In-Memory Accelerators Meet Spiking Direct Feedback Alignment: A Co-Design for Neuromorphic Edge Computing // 2025 IEEE/ACM International Conference On Computer Aided Design. 2025. P. 1–9, doi: 10.1109/ICCAD66269.2025.11240745.

2. A. Bhattacharjee, R. Yin, A. Moitra and P. Panda, Are SNNs Truly Energy-efficient? – A Hardware Perspective // ICASSP 2024 - 2024 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing. 2024. P. 13311–13315, doi: 10.1109/ICASSP48485.2024.10448269.

3. Симулятор импульсных нейронных сетей с учетом особенностей их аппаратного исполнения: свидетельство о гос. регистрации прогр. для ЭВМ № 2025683734 / Дудкин А.П., Рындин Е.А., Андреева Н.В.

4. Lowe-Power J. et al. The gem5 simulator: Version 20.0+ //arXiv preprint arXiv:2007.03152. – 2020.

5. Li, Sheng & Ahn, Jung Ho & Strong, Richard & Brockman, Jay & Tullsen, Dean & Jouppi, Norman. McPAT: An integrated power, area, and timing modeling framework for multicore and manycore architectures. Proceedings of the Annual International Symposium on Microarchitecture, MICRO. 2009. 469–480. 10.1145/1669112.1669172.

6. Deng L. The MNIST database of handwritten digit images for machine learning research // IEEE Signal Process. Mag. 2012. Vol. 29. No. 6. P. 141–142.

7. Рындин Е.А., Андреева Н.В. Аналоговые нейронные и синаптические КМОП-элементы с цифровым управлением для аппаратной реализации импульсных нейронных сетей // Наноиндустрия. 2024. Т. 17. № S10-2 (128). С. 500–508.

8. Wan W., Kubendran R., Schaefer C.et al. A compute-in-memory chip based on resistive random-access memory// Nature. 2022. Vol. 608. Iss. 7923. P. 504–512.

Л.Б. КАРИМУЛЛИНА, Д.Г. КВАШНИН, Н.В. БРИЛЛИАНТОВ
Сколковский институт науки и технологий,
Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН
lada.karimullina@skoltech.ru

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ДИФФУЗИОННЫХ МЕМРИСТОРОВ: АНАЛИТИЧЕСКИЙ И ПЕРВОПРИНЦИПНЫЙ ПОДХОДЫ

В настоящей работе проводится расчет рабочих характеристик диффузионных мемристоров, принцип действия которых основан на формировании и разрушении проводящих нитей из ионов металла между электродами. Использована стохастическая модель формирования нитей, для описания проводимости которых применена квантовая аналитическая теория Лифшица–Кирпиченкова. Аналитическая модель воспроизводит вольт-амперные характеристики и неметаллическую температурную зависимость тока, наблюдаемые в эксперименте. Для количественной оценки точности модели использован первопринципный метод DFT в сочетании с формализмом неравновесных функций Грина (NEGF). Проведено сравнение результатов аналитической и первопринципной теорий на основе вольт-амперных характеристик. Обнаружено заметное расхождение между двумя теориями, что позволяет предположить необходимость модификации аналитической теории – в частности, путём учёта нескольких локализованных состояний.

Ключевые слова: *диффузионные мемристоры, проводящие нити, квантовый транспорт, туннелирование через ловушки, теория Лифшица–Кирпиченкова, DFT, NEGF, нейроморфные вычисления.*

Введение

Нейроморфные вычисления активно развиваются в последние десятилетия [1–4] как ответ на рост энергопотребления приложений искусственного интеллекта. Нейроморфные чипы используют принцип «вычислений в памяти», при котором обработка и хранение информации происходят в искусственном синапсе, что устраняет потери энергии архитектуры фон Неймана [5]. Мемристоры – двухполюсные устройства с многоуровневым резистивным переключением – являются одними из наиболее перспективных кандидатов для таких вычислений.

Диффузионные мемристоры [6], работающие на основе миграции ионов металла [7, 8], являются объектом настоящего исследования. Структурно они представляют собой изолирующий слой между двумя электродами. Приложение напряжения вызывает окисление атомов активного электрода (Ag, Cu), миграцию катионов и формирование проводящих нитей [9, 10], переводя устройство из состояния высокого сопротивления (HRS) в состояние низкого сопротивления (LRS). Обращение полярности разрушает нити [11].

Экспериментально установлено, что проводимость нитей не следует металлической температурной зависимости [8]; более адекватен механизм туннелирования через ловушки (TAT) [8, 13–15]. Однако всеобъемлющей теории, описывающей как формирование нитей, так и их проводимость, до сих пор не создано. В работах [31, 32] была построена стохастическая модель роста нитей, а проводимость рассчитывалась на основе аналитической теории Лифшица–Кирпиченкова и используя подход «из первых принципов». В настоящей работе приводятся результаты, полученные на основе подхода, разработанного в [31, 32], т.е. применяется стохастический метод генерации проводящих нитей, а также, для вычисления проводимости нитей, метод функционала плотности (DFT) и неравновесной функции Грина (NEGF).

Постановка задачи

Задача работы – определение рабочих характеристик диффузионных мемристоров типа p-Si/α-Si/Ag [8] на основе подходов [31, 32], сопоставление полученных результатов с экспериментальными данными и оценка точности аналитической теории, путём сравнения ее предсказаний с результатами первопринципных расчетов методом DFT-NEGF.

Модель формирования проводящих нитей

Уравнение электродиффузии в усредненном поле

Диффузия ионов в электрическом поле описывается моделью с захватом ловушками. Ловушками служат оборванные связи в аморфном кремнии, примеси кислорода и другие дефекты. Захват иона ловушкой означает резкое снижение его подвижности. Освобождение из ловушки – активационный процесс, ускоряющийся приложенным полем, которое понижает барьер соответствующей потенциальной ямы. Для концентраций свободных $n_c(z,t)$ и захваченных $n_t(z,t)$ ионов справедливо следующее уравнение:

$$\frac{\partial n_c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 n_c}{\partial z^2} - eE\mu\frac{\partial n_c}{\partial z} - \frac{n_c}{\tau_{\text{capt}}} + \frac{n_t}{\tau_{\text{rel}}} \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = \frac{n_c}{\tau_{\text{capt}}} - \frac{n_t}{\tau_{\text{rel}}} \tag{2}$$

где D – коэффициент диффузии, $\mu = D/k_B T$ – подвижность ионов, $E = V_{\text{set}}/L$ – электрическое поле, $\tau_{\text{capt}} = \tau_0$ – характерное время захвата, $\tau_{\text{rel}} = \tau_0 \exp\big((\Delta U - e|E|\Delta)/(k_B T)\big)$ – время освобождения из ловушки. Ловушки физически ассоциируются с дефектами α-Si (оборванные связи, вакансии, атомы примесей).

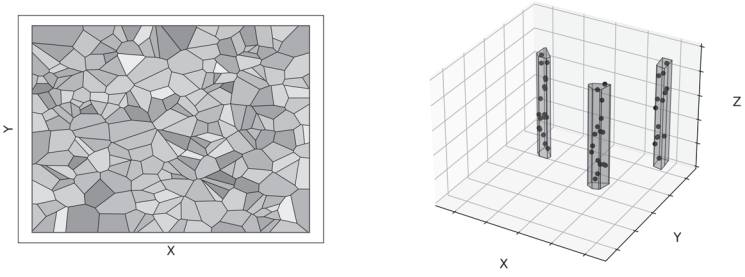
Граничные условия следующие [31, 32]: поглощающее условие при $z = L$ (Pt-электрод) и поток испарения при $z = 0$ (Ag-электрод):

$$\left(-D\frac{\partial n_c}{\partial z} + eE\mu n_c\right)|_{z=0} = B\left(n_{\text{eq}} - n_c\right)\Theta\big(n_{\text{eq}} - n_c\big)|_{z=0} \tag{3}$$

Константа $B(T)$ определяется потенциальными барьерами на границе электрод–изолятор [31, 32] и служит в настоящем подходе подгоночным параметром.

Метод призм Вороного

Для генерации конфигураций проводящих нитей применяется метод «призм Вороного». Профиль $n_{\text{tot}}(z,t)$ вычисляется из (1)–(3), межэлектродное пространство разбивается на m слоёв с $N_k(t) = n_{\text{tot}}(z_k,t)\,\Delta L\,S$ ионами в каждом. Разбиение Вороного первого слоя порождает призматические области; цепочки ионов внутри одной призмы идентифицируются как нити; среди них отбираются только те, чей коэффициент прохождения отличен от нуля (рис. 1); подробно метод призм Вороного изложен в работе [31].



а *б*

Рис. 1. Метод призм Вороного: построение проводящих нитей:
а) разбиение Вороного первого слоя; б) отбор проводящих цепочек

Электронный транспорт в проводящих нитях

Аналитическая теория Лифшица–Кирпиченкова

Проводимость нитей описывается теорией Лифшица–Кирпиченкова [17–20] – строгим обобщением ТАТ. Последняя, во-первых, явно учитывает положения примесных атомов в проводящей цепочке, во-вторых не использует «сильное» предположение о декогерентности последовательных переходов от одного локализованного состояния к другому. Это, в частности, позволяет описывать и резонансное туннелирование [20]. Гамильтониан системы имеет вид:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + U_0 + \sum_{j=1}^{m} \hat{u}\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j\right), \quad 0 \le z,\, z_j \le L \tag{4}$$

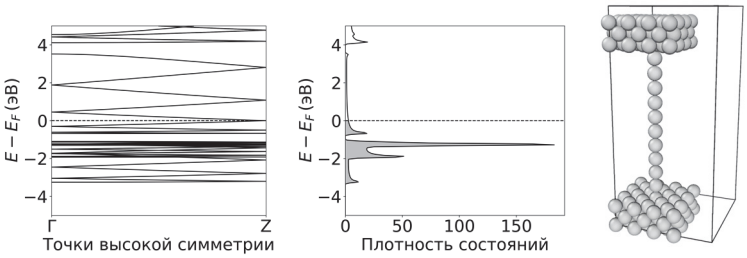
где U_0 – барьер изолятора, $\hat{u}\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j\right)$ – потенциал возмущения j-й примеси. Используя указанный Гамильтониан проводится расчет коэффициента подбарьерного прохождения для заданного распределения координат m примесей $\{r_m\}$ при данном напряжении между электродами V и температуре T. Тогда ток через проводящую нить из m ионов имеет вид [19–20]:

$$i_m(V, T, \{r_m\}) = G_0 \int_0^{U_0} [n_F(\varepsilon, T) - n_F(\varepsilon + eV, T)]\; d_m(\varepsilon, \{r_m\})\, d\varepsilon \tag{5}$$

где $G_0 = 2e^2/h$ – квант проводимости, n_F – распределение Ферми. Суммирование по ансамблю нитей даёт полный ток через мемристор.

Первопринципный подход DFT+NEGF

Для оценки точности аналитической теории выполнены первопринципные расчёты для прямолинейной цепочки эквидистантных ионов Ag^+ в вакууме между электродами. Использован метод SIESTA (GGA-PBEsol [28]) с модулем TranSIESTA (NEGF [22–25]) и TBTrans (формализм Ландауэра–Бюттикера). Применялась сетка k-точек в зоне Бриллюэна – $1 \times 1 \times 80$; электроды – Ag(010) и Pt(010) по два слоя; электронная температура 300 К. Зонная структура и плотность состояний для $d = 0{,}29$ нм приведены на рис. 2.



а *б* *в*

Рис. 2. Электронная структура цепочки эквидистантных ионов Ag^+ ($d = 0{,}29$ нм): а) зонная структура, б) плотность состояний; в) атомистическая модель системы электрод–нить–электрод для расчёта характеристик электронного транспорта

Результаты

Вольт-амперная характеристика

Моделирование ВАХ проводится по экспериментальному протоколу [8]: ступенчатое изменение напряжения с шагом 1 В каждые 8,6 с до $+7$ В и обратно. Параметры: $S = 0{,}1 \times 0{,}1$ мкм^2 (площадь электрода),

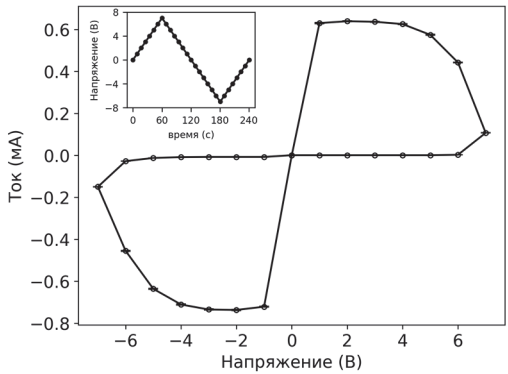


Рис. 3. Вольт-амперная характеристика мемристора, полученная при ступенчатом изменении напряжения (см. текст)

$U_0 = 3{,}55$ эВ (потенциальный барьер диэлектрика), $\varepsilon_F = 3{,}1$ эВ (энергия Ферми), $\varepsilon_0 = 3{,}2$ эВ (энергия локализованного состояния). Для прямого сравнения с экспериментом смоделированный ток масштабирован в 100 раз, что отражает меньшую активную площадь, используемую в моделировании, – на два порядка ниже экспериментальной. Такое масштабирование согласуется с линейной зависимостью тока от площади устройства. ВАХ усреднены по 1000 реализациям (рис. 3). Наблюдается гистерезис, качественно согласующийся с экспериментом [8, 26]; ловушки с порогом активации воспроизводят пороговый характер разрушения нитей.

Неметаллическая температурная зависимость тока

Для расчёта температурной зависимости использовались следующие параметры: $V_{\text{set}} = 7$ В, напряжение считывания – 0,5 В, 150–300 К. Полученные результаты также были усреднены по 1000 реализациям (рис. 4). Значения тока растут с температурой, что свидетельствует о неметаллическом механизме переноса заряда.

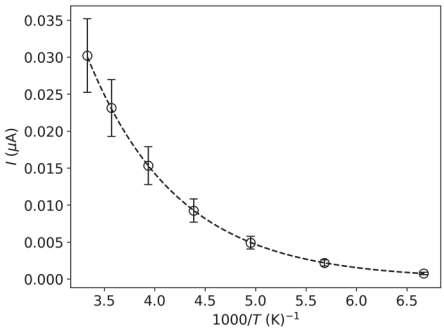
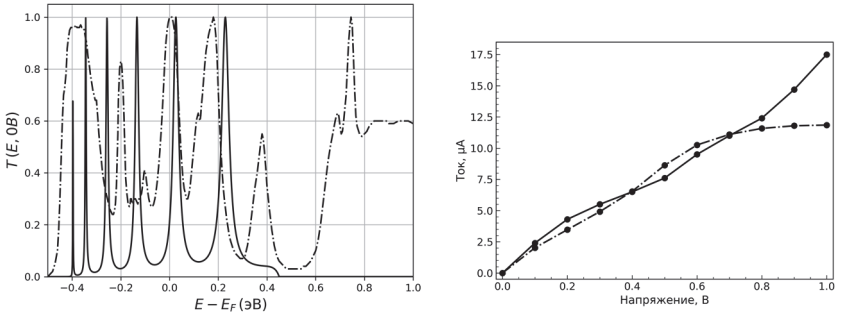


Рис. 4. Температурная зависимость тока I как функция обратной температуры $1000/T$. Штриховая линия – экспоненциальная аппроксимация

Сопоставление аналитической теории и первопринципных расчётов

Для $d = 0{,}29$ нм коэффициент прозрачности аналитической теории близок к первопринципному вблизи энергии Ферми (рис. 5). Однако ВАХ заметно расходятся: аналитическая теория занижает ток.



а *б*

Рис. 5. Сравнение аналитической теории и первопринципного подхода DFT-NEGF: а) коэффициент туннельной прозрачности для цепочки с $d = 0{,}29$ нм как функция энергии: сплошная линия – аналитическая теория, штриховая линия – расчёт DFT+NEGF; б) ВАХ для $d = 0{,}29$ нм: $U_0 = 3{,}55$ эВ, $\varepsilon_F = 3{,}1$ эВ; сплошная линия – расчёт DFT+NEGF, штрихпунктирная линия с точками – аналитическая модель

Это объясняется тем, что аналитическая теория предполагает лишь одно локализованное состояние на ион Ag^+, тогда как DFT+NEGF учитывает многие проводящие каналы с орбитально-специфическими эффектами. Расхождение указывает на необходимость учёта нескольких локализованных состояний.

Заключение

В настоящей работе проводится расчет рабочей характеристики (ВАХ) диффузионных мемристоров типа p-Si/α-Si/Ag [8] на основе стохастической модели формирования нитей (диффузия ионов с захватом ловушками) и квантовомеханического подхода к описанию проводимости – аналитического и «первопринципного». Аналитическая теория Лифшица–Кирпиченкова воспроизводит гистерезисное поведение ВАХ, пороговый отклик на импульсы и неметаллическую температурную зависимость тока, отражающую аналогичное поведение проводимости.

Первопринципный подход DFT+NEGF показывает хорошее согласие коэффициентов прозрачности вблизи энергии Ферми, однако ВАХ расходятся: аналитическая теория занижает величину тока. Учёт нескольких локализованных состояний является предметом дальнейших исследований.

Развитие предложенной теории открывает перспективы для предсказательного моделирования мемристоров как элементной базы нейроморфных вычислительных архитектур.

Благодарности

Авторы благодарят Центр обработки и хранения научных данных ДВО РАН (https://lits.ccfebras.ru/) за вычислительные ресурсы. Работа поддержана грантом РНФ № 25-71-30008, https://rscf.ru/project/25-71-30008/.

Список литературы

1. Yang J.J., Strukov D.B., Stewart D.R. Memristive devices for computing // Nature Nanotechnology. 2012. Vol. 8. P. 13–24.

2. Marković D., Mizrahi A., Querlioz D., Grollier J. Physics for neuromorphic computing // Nature Reviews Physics. 2020. Vol. 2. P. 499–510.

3. Goi E., Zhang Q., Chen X., Luan H., Gu M. Perspective on photonic memristive neuromorphic computing // PhotoniX. 2020. Vol. 1. doi:10.1186/s43074-020-0001-6.

4. Xia Q., Yang J.J. Memristive crossbar arrays for brain-inspired computing // Nature Materials. 2019. Vol. 18. P. 309–323.

5. Mehonic A., Kenyon A.J. Brain-inspired computing needs a master plan // Nature. 2022. Vol. 604. P. 255–260.

6. Zhu J., Zhang T., Yang Y., Huang R. A comprehensive review on emerging artificial neuromorphic devices // Appl. Phys. Rev. 2020. Vol. 7. P. 011312.

7. Yeon H., Lin P., Choi C. et al. Alloying conducting channels for reliable neuromorphic computing // Nature Nanotechnology. 2020. Vol. 15. P. 574–579.

8. Samsonova A., Yegiyan S., Klimenko O., Antonov V.N., Paradezhenko G., Prodan D., Pervishko A., Yudin D., Brilliantov N. Fabrication and study of the p-Si/α-Si/Ag memristor crossbar array // JETP. 2024. Vol. 166. P. 255–260.

9. Zhuo Y. et al. A dynamical compact model of diffusive and drift memristors for neuromorphic computing // Advanced Electronic Materials. 2022. Vol. 8. P. 2101132.

10. Wang Z., Joshi S., Savel'ev S.E. et al. Memristors with diffusive dynamics as synaptic emulators for neuromorphic computing // Nature Mater. 2017. Vol. 16. P. 101–108.

11. Pattnaik D.P., Ushakov Y., Zhou Z. et al. Temperature control of diffusive memristor hysteresis and artificial neuron spiking // Phys. Rev. Appl. 2023. Vol. 19. P. 024065.

12. Hu S.G., Wu S.Y., Jia W.W. et al. Review of nanostructured resistive switching memristor and its applications // Nanosci. Nanotechnol. Lett. 2014. Vol. 6. P. 729–757.

13. Cheng X.R., Cheng Y.C., Liu B.Y. Nitridation-enhanced conductivity and current transport in thin nitrided SiO_2 // J. Appl. Phys. 1988. Vol. 63. P. 797–802.

14. Houng M.P., Wang Y.H., Chang W.J. Current transport in trapped oxides: a generalized trap-assisted tunneling model // J. Appl. Phys. 1999. Vol. 86. P. 1488–1491.

15. Mainali P., Wagle P., McPherson C., McIlroy D.N. The impact of trap-assisted tunneling on synaptic potentiation in α-Fe_2O_3/p-Si // Sci. 2023. Vol. 5. P. 3.

16. Bi C., Li Y., Liu G. et al. Temperature-modulated switching behaviors of diffusive memristors with Ag migration in a-C matrix // Appl. Phys. Lett. 2023. Vol. 122. P. 153502.

17. Лифшиц И.М., Кирпиченков В.Я. Туннельная прозрачность неупорядоченных систем // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. С. 989–1016.

18. Кирпиченков В.Я. Резонансные вольт-амперные характеристики трёхмерного туннельного перехода со слабым беспорядком // ЖЭТФ. 1999. Т. 116. С. 1048–1057.

19. Кирпиченков В.Я., Кирпиченкова Н.В., Лозин О.И. Низкотемпературный вклад в резонансную туннельную проводимость неупорядоченного N–I–N перехода // Письма в ЖЭТФ. 2016. Т. 104. С. 500–503.

20. Кирпиченков В.Я., Кирпиченкова Н.В., Лозин О.И. Бифуркации при образовании низкотемпературных максимумов туннельной проводимости «грязного» N–I–N перехода // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 105. С. 613–616.

21. Yazyev O.V., Louie S.G. Electronic transport in polycrystalline graphene // Nature Materials. 2010. Vol. 9. P. 806–809.

22. Brandbyge M., Mozos J.-L., Ordejón P., Taylor J., Stokbro K. Density-functional method for nonequilibrium electron transport (TranSIESTA) // Physical Review B. 2002. Vol. 65. P. 165401.

23. Taylor J., Guo H., Wang J. Ab initio modeling of quantum transport properties // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 63. P. 245407.

24. Xue Y., Datta S., Ratner M.A. First-principles based matrix Green's function approach to molecular electronic devices // Chemical Physics. 2002. Vol. 281. P. 151.

25. Thygesen K.S., Bollinger M.V., Jacobsen K.W. Conductance calculations with a wavelet basis set // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 67. P. 115404.

26. Yakopcic C., Taha T.M., Subramanyam G., Pino R.E., Rogers S. A memristor device model // IEEE Electron Device Lett. 2011. Vol. 32. No. 10. P. 1436–1438.

27. Samsonova A.V., Dremov V., Klimenko O., Brilliantov N., Antonov V.N. Investigation of filamentation in a-Si/Ag/Cu memristors with atomic force microscope // Appl. Phys. Lett. Submitted (2026).

28. Hussein T.A., Noori M.D. Structural properties using PBEsol functional // J. Phys.: Conf. Ser. 2021. Vol. 1973. P. 012055.

29. Malica C., Dal Corso A. Quasi-harmonic temperature dependent elastic constants // J. Phys.: Condens. Matter. 2021. Vol. 33. P. 475901.

30. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations // Physical Review B. 1976. Vol. 13. P. 5188–5192.

31. L.B. Karimullina, D.G. Kvashnin, D. Ivanov, N.V. Brilliantov. Quantum theory of diffusive memristors // Neurotechnologies & Neuroelectronics. 2025. (in press). URL: https://etotma.mipt.ru/.

32. L.B. Karimullina, N.V. Brilliantov. First principle quantum theory of diffusive memristors // Physical Review Applied. (in submission process).

Секция

Нейронные сети в компьютерном зрении и сенсорных системах

И.А. ЕРМАКОВ, А.И. КАНЕВ
Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
eia23k023@student.bmstu.ru, aikanev@bmstu.ru

ВЛИЯНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ОБУЧАЮЩИХ ДАННЫХ НА КАЧЕСТВО U-NET ПРИ СЕГМЕНТАЦИИ АЭРОФОТОСНИМКОВ

Исследовано влияние объёма размеченных данных и предобучения на ImageNet на качество сегментации аэрофотоснимков моделью U-Net с кодировщиком ResNet-34 (LandCover.ai). Сокращение выборки до 50 % сохраняет 91 % пикового mIoU, а зависимость качества от объёма данных описывается логарифмической функцией ($R^2 = 0{,}986$). Предобученная модель на 50 % данных превосходит обученную с нуля на полном наборе. Эксперимент с тремя подвыборками показал, что немонотонность класса «дорога» не воспроизводится.

Ключевые слова: *сегментация аэрофотоснимков, U-Net, ResNet-34, объём обучающих данных, перенос обучения, LandCover.ai.*

Введение

Семантическая сегментация аэрофотоснимков и спутниковых изображений лежит в основе широкого круга задач дистанционного зондирования: картографирования земного покрова, мониторинга нарушений лесного покрова, оценки состояния посевов и анализа городской застройки. В отличие от классификации сцены, попиксельная разметка требует от модели одновременно учитывать глобальный контекст и точно локализовать границы мелких объектов – краёв дорог или контуров зданий.

Доминирующей архитектурой для этой задачи стали свёрточные сети типа кодировщик-декодировщик, в первую очередь U-Net [1]. Симметричная структура U-Net с пропускающими связями объединяет семантические признаки высокого уровня с пространственными деталями ранних слоёв

кодировщика, что критично для объектов существенно различающихся масштабов.

Практически важным является вопрос о том, какой объём точно размеченных данных действительно необходим. Для аэрофотоснимков попиксельная разметка обходится дорого: ручное выделение зданий, дорог и границ растительности требует значительных экспертных трудозатрат. Перенос обучения с больших наборов для классификации (ImageNet [2]) частично снимает эту проблему: замена кодировщика U-Net на предобученный ResNet-34 [3] является стандартной практикой. Однако количественная оценка выигрыша от предобучения по сравнению с обучением с нуля при разных объёмах данных для многоклассовой сегментации аэрофотоснимков систематически не проводилась.

В работе [4] эмпирически показано, что точность в задачах компьютерного зрения растёт логарифмически с объёмом обучающих данных. В [5] продемонстрировано, что двухэтапная схема обучения снижает требования к объёму разметки при классификации спутниковых снимков. В работе [6] установлено, что лесные дороги имеют наименьшую точность распознавания (0,47) среди классов нарушений на снимках Sentinel-2, что объясняется тонкой линейной геометрией и перекрытием кронами – эти же трудности характерны и для класса «дорога» в настоящей работе. Из современных архитектур следует отметить трансформерные модели AerialFormer [10] и UNetFormer [11], а также полуконтролируемые методы, явно учитывающие дисбаланс классов [12].

Вклад настоящей работы состоит в следующем: (1) количественно определена зависимость mIoU, mDice и IoU по классам от объёма обучающей выборки для U-Net + ResNet-34 на наборе LandCover.ai [7]; (2) построена и оценена логарифмическая модель масштабирования; (3) в контролируемых условиях сопоставлено предобучение на ImageNet и обучение с нуля; (4) на трёх вариантах подвыборки показано, что наблюдавшаяся в единичном запуске немонотонность класса «дорога» не воспроизводится.

Постановка задачи

Решается задача попиксельной классификации RGB-аэрофотоснимков на C = 5 классов: фон (0), здание (1), лес (2), вода (3), дорога (4). Качество модели оценивается мерой пересечения по объединению (IoU) и коэффициентом Дайса для каждого класса c:

$$IoU_c = \frac{TP_c}{(TP_c + FP_c + FN_c)}, \quad (1)$$

$$Dice_c = \frac{2TP_c}{(2TP_c + FP_c + FN_c)}, \quad (2)$$

где TP, FP, FN с индексом c – число истинно положительных, ложноположительных и ложноотрицательных пикселей класса c, а также усреднёнными по классам метриками:

$$mIoU = \frac{1}{5} IoU_c, \quad mDice = \frac{1}{5} \sum Dice_c. \tag{3}$$

Исследуются два вопроса: как mIoU зависит от размера обучающей выборки N при инициализации кодировщика весами ImageNet и каков количественный выигрыш от предобучения по сравнению со случайной инициализацией при разных объёмах данных.

Данные и методика эксперимента

Набор данных LandCover.ai v1 [7] содержит 41 ортофотоплан территории Польши высокого разрешения (25–50 см на пиксель) с попиксельной разметкой пяти классов. Нарезка на фрагменты 512×512 даёт 10 674 пары «изображение – маска». Фиксированное случайное разбиение (seed = 42) делит их на 9073 обучающих и 1601 валидационный фрагмент; валидационная выборка неизменна во всех экспериментах.

Набор характеризуется выраженным дисбалансом классов: на фон и лес приходится около 44 % и 37 % пикселей соответственно, на воду – около 8 %, на здания – около 7 %, на дороги – около 4 %. Этот дисбаланс в сочетании с тонкой линейной геометрией дорог является ключевым фактором их низкого IoU.

Архитектура: U-Net (библиотека segmentation_models.pytorch) с кодировщиком ResNet-34. В варианте с предобучением используются веса ImageNet-1K, в варианте с нуля все веса инициализируются случайно. Гиперпараметры: оптимизатор AdamW (скорость обучения 1e-3), планировщик CosineAnnealingLR, размер батча 4, 20 эпох, невзвешенная категориальная перекрёстная энтропия. Конвейер аугментаций (случайная обрезка, отражения по горизонтали и вертикали, повороты на 90°, нормализация ImageNet) одинаков во всех условиях, что изолирует влияние объёма данных и типа инициализации. Для эксперимента с объёмом данных использовались вложенные подвыборки: 10 % входит в 25 %, 25 % – в 50 %, 50 % – в 100 % (seed = 123). Оборудование: NVIDIA GTX 1650 Ti (4 ГБ), CUDA 12.1, Python 3.12.7.

Отбор лучшей эпохи и итоговая оценка выполняются на одной и той же валидационной выборке. Поскольку подбор гиперпараметров не производился и все условия следуют одинаковому протоколу, это не влияет на сравнение вариантов между собой; абсолютные значения при этом следует считать несколько оптимистичными.

Зависимость качества от объёма данных

В табл. 1 приведены средние метрики для каждой доли обучающей выборки. Сокращение данных до 50 % даёт mIoU = 0,671, то есть снижение на 0,065 при сохранении 91 % пикового качества. Прирост mIoU при каждом удвоении объёма данных сублинеен: +0,084 (10 %→25 %), +0,031 (25 %→50 %), +0,065 (50 %→100 %), что согласуется с логарифмическим масштабированием, описанным в [4].

Таблица 1

Средние метрики при разных долях обучающей выборки

Доля	Фрагментов	mIoU	Сохранено, %	mDice
10 %	907	0,556	76	0,679
25 %	2268	0,640	87	0,761
50 %	4536	0,671	91	0,778
100 %	9073	**0,736**	100	**0,834**

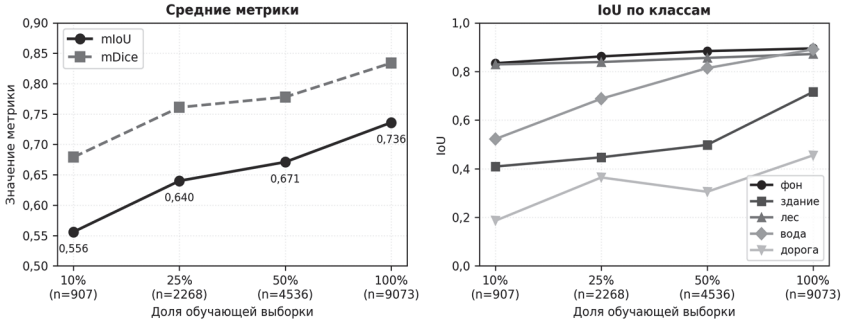


Рис. 1. Слева – средние метрики mIoU и mDice в зависимости от доли обучающей выборки; справа – IoU по классам

Логарифмическая регрессия (рис. 2) даёт зависимость

$$\mathrm{mIoU} \approx 0{,}075 \ln(N) + 0{,}046, \quad R^2 = 0{,}986. \tag{4}$$

Высокое значение R^2 указывает на хорошее согласие с логарифмическим законом в исследованном диапазоне. Соотношение (4) даёт практическую формулу оценки объёма разметки: $N^* = \exp((\mathrm{mIoU}_0 - 0{,}046) / 0{,}075)$. Здесь N – абсолютное число обучающих фрагментов; в долях полного набора, f = N / 9073, та же зависимость записывается как

mIoU ≈ 0,075 ln(f) + 0,729, что удобнее переносить на наборы другого размера.

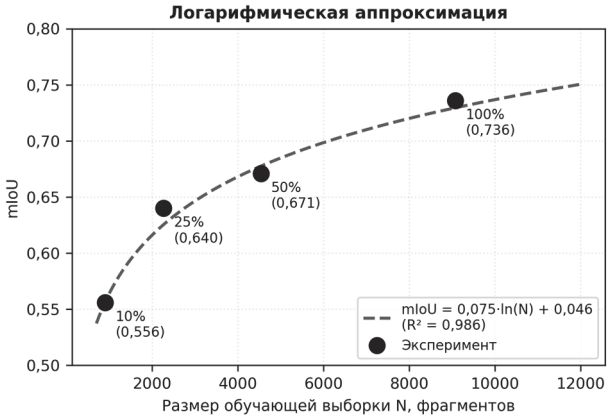


Рис. 2. Логарифмическая аппроксимация зависимости mIoU от размера обучающей выборки

Анализ по классам

В табл. 2 приведены значения IoU по классам. Фон и лес устойчивы: IoU превышает 0,81 даже при 10 % данных. Вода улучшается с 0,522 до 0,891 (+0,369). Здания дают резкий прирост между 50 % и 100 % (0,498 → 0,716). Дорога в данном запуске демонстрирует немонотонность: IoU при 50 % (0,305) ниже, чем при 25 % (0,364). Как показано далее, этот эффект не воспроизводится и является следствием случайности отдельного запуска.

Таблица 2

IoU по классам при разных долях обучающей выборки

Класс	10 %	25 %	50 %	100 %
Фон	0,834	0,862	0,884	**0,895**
Здание	0,409	0,447	0,498	**0,716**
Лес	0,829	0,839	0,856	**0,872**
Вода	0,522	0,688	0,814	**0,891**
Дорога	0,186	0,364	0,305	**0,455**

Предобучение на ImageNet и обучение с нуля

Для прямой оценки выигрыша от предобучения сопоставлены варианты с инициализацией весами ImageNet и со случайной инициализацией при 50 и 100 % данных. Начальное состояние декодировщика зафиксировано в обоих случаях, поэтому различия отражают именно тип инициализации кодировщика. Отметим, что значение mIoU для предобученной модели на 100 % данных в табл. 3 (0,725) отличается от значения в табл. 1 (0,736): в эксперименте с объёмом данных начальное состояние декодировщика не фиксировалось, тогда как в настоящем эксперименте оно фиксировано для корректности сравнения.

Таблица 3

Предобучение на ImageNet и обучение с нуля: mIoU и IoU по классам

Инициализация	mIoU	Фон	Здание	Лес	Вода	Дорога
Предобуч., 50 %	0,689	0,883	0,558	0,855	0,783	0,364
С нуля, 50 %	0,602	0,860	0,353	0,843	0,687	0,266
Предобуч., 100 %	**0,725**	**0,899**	**0,572**	**0,870**	**0,859**	**0,427**
С нуля, 100 %	0,629	0,863	0,456	0,845	0,695	0,288

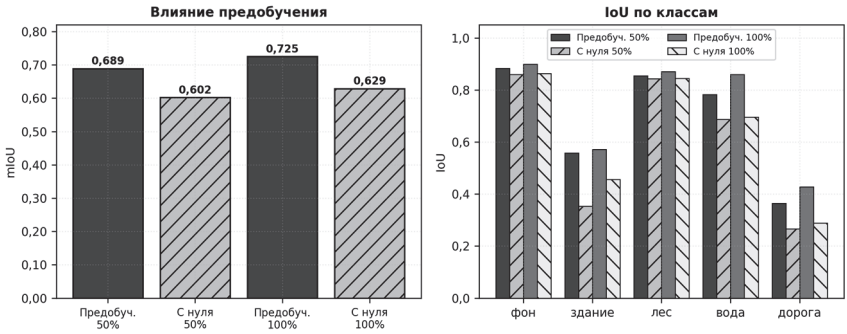


Рис. 3. Слева – сравнение mIoU при предобучении и обучении с нуля; справа – IoU по классам для четырёх условий

Предобучение даёт устойчивый и значительный выигрыш: +0,087 при 50 % данных (+14,4 % относительно) и +0,096 при 100 % (+15,2 %). Наиболее показательный результат состоит в том, что предобученная модель, обученная на 50 % данных (mIoU = 0,689), превосходит модель, обученную

с нуля на полном наборе (mIoU = 0,629), на 0,059 (+9,4 %). Таким образом, в рассмотренных условиях предобучение на ImageNet эквивалентно примерно удвоению объёма размеченной выборки.

Выигрыш распределён по классам крайне неравномерно. Здания при 50 % данных выигрывают +0,205 (+58 % относительно) – наибольший абсолютный прирост, дороги +0,098 (+37 %). Напротив, лес и фон выигрывают лишь +0,012 и +0,023. Это указывает на то, что предобучение сильнее всего помогает классам малой площади со сложными границами.

Влияние состава подвыборки

Чтобы проверить, является ли немонотонность класса «дорога» свойством класса или артефактом конкретной подвыборки, эксперименты при 25 и 50 % данных были повторены с тремя вариантами случайного отбора подвыборки (seed = 123, 456, 789; вариант 123 воспроизводит подвыборку, использованную выше). Все остальные источники случайности фиксировались: разбиение на обучающую и валидационную выборки, начальное состояние декодировщика и протокол обучения. Всего выполнено шесть запусков.

Таблица 4

Среднее ± стандартное отклонение по трём вариантам подвыборки

Метрика	25 % данных	50 % данных
mIoU	0,644 ± 0,019	0,673 ± 0,016
Фон	0,868 ± 0,006	0,878 ± 0,008
Здание	0,463 ± 0,042	0,522 ± 0,019
Лес	0,847 ± 0,002	0,854 ± 0,005
Вода	0,724 ± 0,056	0,744 ± 0,040
Дорога	0,320 ± 0,005	0,369 ± 0,007

Инверсия не воспроизводится: во всех трёх парных запусках IoU дороги при 50 % данных выше, чем при 25 % (0 инверсий из 3), при среднем приросте +0,048 – на порядок больше, чем разброс между вариантами подвыборки внутри каждой доли (±0,005 и ±0,007). Следовательно, немонотонность, отмеченная в единичном запуске, не является воспроизводимым эффектом.

Отдельного внимания заслуживает вопрос о том, какие классы в действительности чувствительны к составу подвыборки. Усреднённое по двум долям стандартное отклонение максимально для воды (0,054) и зданий

(0,035) и существенно меньше для дороги (0,007), леса (0,004) и фона (0,008). Таким образом, дорога не является классом, наиболее зависящим от того, какие именно фрагменты попали в обучение. Сопоставление запуска с seed = 123, использующего в точности те же фрагменты, что и основной эксперимент, со значениями табл. 2 даёт расхождение IoU дороги на −0,048 и +0,060 при идентичной обучающей выборке – единственным отличием является начальное состояние декодировщика. Это указывает на то, что наблюдаемая нестабильность класса «дорога» может быть в большей степени связана со случайностью оптимизации и инициализации, чем с составом подвыборки, что согласуется с разреженностью градиентного сигнала и долей около 4 % пикселей. Прямого варьирования начального состояния при фиксированных данных в настоящей работе не проводилось, поэтому данный вывод носит характер предположения, требующего отдельной проверки.

Обсуждение

Результат, состоящий в том, что предобученная модель на 50 % данных превосходит модель, обученную с нуля на полном наборе, имеет прямое практическое следствие: при высокой стоимости разметки использование предобученного кодировщика позволяет отказаться примерно от половины обучающих аннотаций без потери качества. Это развивает результат [5], перенося его с парадигмы «предобучение и дообучение» на стандартный подход с предобученным кодировщиком.

Логарифмическая зависимость (4) даёт удобную формулу планирования бюджета разметки, однако её коэффициенты специфичны для сочетания U-Net + ResNet-34 и набора LandCover.ai. Для другой архитектуры, набора данных или схемы аугментации константы требуют повторной калибровки, тогда как сама логарифмическая форма – а значит, и убывающая отдача при больших объёмах – по-видимому, сохраняется [4]. На практике достаточно провести пилотные запуски на двух-трёх долях выборки и оценить коэффициенты до начала полномасштабной разметки.

Низкий абсолютный IoU дороги и её высокая нестабильность от запуска к запуску объясняются совокупностью факторов: тонкой линейной геометрией, дающей разреженный градиентный сигнал, выраженным дисбалансом классов и частым перекрытием кронами деревьев. При обучении с нуля ситуация усугубляется: при 50 % данных IoU дороги падает до 0,266. Аналогичная картина отмечена в [6] при выделении лесных дорог на снимках Sentinel-2.

Полученные результаты обосновывают избирательный подход к разметке: классы с устойчивой геометрией (фон, лес) допускают существенное сокращение объёма данных практически без потери качества, тогда как здания и дороги требуют полного набора либо специальных мер – взвешенных функций потерь, активного обучения или архитектур, ориентированных на тонкие объекты.

Ограничения работы. Основные эксперименты по объёму данных и сравнению типов инициализации выполнены с одним фиксированным начальным состоянием. Многовариантное исследование проведено для долей 25 и 50 %, чего оказалось достаточно для опровержения немонотонности класса «дорога», однако точки 10 и 100 %, а также сравнение предобучения с обучением с нуля остаются единичными запусками. Использование невзвешенной перекрёстной энтропии, вероятно, занижает IoU дорог и зданий; влияние взвешенных функций потерь на характер зависимости от объёма данных остаётся открытым вопросом. Результаты получены для одной архитектуры и одного набора данных, охватывающего территорию Польши, поэтому перенос количественных выводов на другие регионы, типы съёмки и архитектуры требует независимой проверки.

Заключение

Проведено контролируемое исследование влияния объёма обучающих данных и предобучения на ImageNet на качество сегментации аэрофотоснимков моделью U-Net с кодировщиком ResNet-34 на наборе LandCover.ai. Установлено следующее. Сокращение размеченной выборки до 50 % сохраняет 91 % пикового значения mIoU (0,671 против 0,736), а зависимость качества от объёма данных описывается соотношением $\mathrm{mIoU} \approx 0{,}075 \ln(N) + 0{,}046$ при $R^2 = 0{,}986$. Предобученная модель на 50 % данных ($\mathrm{mIoU} = 0{,}689$) превосходит модель, обученную с нуля на полном наборе ($\mathrm{mIoU} = 0{,}629$), то есть предобучение в рассмотренных условиях эквивалентно примерно удвоению объёма разметки. Выигрыш от предобучения распределён по классам крайне неравномерно: здания выигрывают 58 %, дороги 37 %, тогда как фон и лес практически не затронуты. Наконец, наблюдавшаяся в единичном запуске немонотонная зависимость класса «дорога» от объёма данных не воспроизводится при повторном отборе подвыборки: IoU растёт с $0{,}320 \pm 0{,}005$ при 25 % до $0{,}369 \pm 0{,}007$ при 50 % данных без единой инверсии в трёх парных запусках.

Практические рекомендации по распределению бюджета разметки состоят в следующем: использовать предобученные кодировщики, приме-

нять избирательную по классам разметку и рассматривать тонкие протяжённые объекты типа дорог как требующие полного покрытия аннотациями и повторных запусков до формулировки выводов о поклассовых тенденциях.

Список литературы

1. Ronneberger O., Fischer P., Brox T. U-Net: Convolutional networks for biomedical image segmentation // Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention (MICCAI 2015). LNCS. Vol. 9351. Springer, 2015. P. 234–241.

2. Deng J., Dong W., Socher R., Li L.-J., Li K., Fei-Fei L. ImageNet: A large-scale hierarchical image database // Proc. IEEE Conf. on Computer Vision and Pattern Recognition. 2009. P. 248–255.

3. He K., Zhang X., Ren S., Sun J. Deep residual learning for image recognition // Proc. IEEE Conf. on Computer Vision and Pattern Recognition. 2016. P. 770–778.

4. Sun C., Shrivastava A., Singh S., Gupta A. Revisiting unreasonable effectiveness of data in deep learning era // Proc. IEEE Int. Conf. on Computer Vision. 2017. P. 843–852.

5. Maggiori E., Tarabalka Y., Charpiat G., Alliez P. Convolutional neural networks for large-scale remote-sensing image classification // IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing. 2017. Vol. 55. No. 2. P. 645–657.

6. Канев А.И., Тарасов А.В., Шихов А.Н., Подопригорова Н.С., Сафонов Ф.А. Идентификация вырубок и ветровалов по спутниковым снимкам Sentinel-2 с использованием U-Net // Космические исследования. 2023. Т. 61. Прил. 1. С. S152–S162.

7. Boguszewski A., Batorski D., Ziemba-Jankowska N., Dziedzic T., Zambrzycka A. LandCover.ai: Dataset for automatic mapping of buildings, woodlands, water and roads from aerial imagery // Proc. IEEE/CVF Conf. on Computer Vision and Pattern Recognition Workshops. 2021. P. 1102–1110.

8. Chen L.-C., Zhu Y., Papandreou G., Schroff F., Adam H. Encoder-decoder with atrous separable convolution for semantic image segmentation // Proc. European Conf. on Computer Vision (ECCV). 2018. P. 801–818.

9. Lin T.-Y., Goyal P., Girshick R., He K., Dollar P. Focal loss for dense object detection // Proc. IEEE Int. Conf. on Computer Vision. 2017. P. 2980–2988.

10. Yamazaki K., Hanyu T., Tran M., Garcia A., Tran A., McCann R., Liao H., Rainwater C., Adkins M., Molthan A., Cothren J., Le N. AerialFormer: Multi-resolution transformer for aerial image segmentation // Remote Sensing. 2024. Vol. 16. No. 16. P. 2930.

11. Wang L., Li R., Zhang C., Fang S., Duan C., Meng X., Atkinson P.M. UNetFormer: A UNet-like transformer for efficient semantic segmentation of remote sensing urban scene imagery // ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing. 2022. Vol. 190. P. 196–214.

12. Huang W., Shi Y., Xiong Z., Zhu X.X. Decouple and weight semi-supervised semantic segmentation of remote sensing images // ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing. 2024. Vol. 212. P. 13–26.

A.Y. MAKSIMOVA, I.V. CHERNYADIEV, O.A. LAMCEV
Institute of Applied Mathematics and Mechanics, Donetsk, Russian Federation
maximova.alexandra@mail.ru

AN INTERPRETABLE HYBRID NEURAL-SYMBOLIC SYSTEM FOR MONITORING REGULATED ACTIONS IN INDUSTRIAL VIDEO STREAMS*

This paper proposes a new computer vision approach for monitoring regulated actions in an industrial environment. The proposed method identifies regulated actions through the detection of key objects and the logical analysis of spatial-temporal relationships between them in accordance with the process description. The requirements for the detected actions can be modified by updating the logical inference algorithm rather than retraining the entire model. At the first stage, a standard computer vision pipeline is used to detect and track objects in individual frames. Then, a logical algorithm analyzes the detected objects, their spatial relations, and temporal interactions. The logical rules are derived from the textual description of the technological regulation. The rules applied during event evaluation provide an explanation of the resulting outcome and make it possible to identify the cause of the violation. This model was tested using its own benchmark for each farm station on graphics processing units (GPUs), achieving an overall F1-score for SOP motion detection ranging from 97.20 to 99.90 %, along with a high mAP for individual object detection ranging from 84.55 to 92.22 %, which proves its practicality and effectiveness. Importantly, these high scores are achieved despite detector imperfections, as the logical rules serve as a verification layer that corrects false predictions and recovers missed detections through spatio-temporal reasoning

Keywords: *hybrid system, computer vision, logical inference, neural network, knowledge formalization, SOP, YOLO.*

Introduction

Industrial workflows commonly include repetitive operations that must be performed in accordance with a standard operating procedure (SOP). An SOP specifies the required processing steps and define their order, duration, permitted

* The study was carried out with the financial support of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation FREM-2024-0001 (Registration number 1023111000141- 9-1.2.1).

time intervals, working zones and tools. Failure to comply with these requirements may reduce product quality and process efficiency. Consequently, automatic video-based monitoring of SOP compliance is an important industrial problem.

Video surveillance systems overall used in industrial facilities. However, automation of such video sequence analysis and understanding the meaning of what is happening remains an important challenge. Currently, this task is performed by human operators, who may be unable to observe every detail of routine operations.

Computer vision methods provide a natural way to automate such monitoring. However, direct recognition of human actions in industrial environments remains challenging. The visual scene may contain several interacting objects, partial occlusions, small tools, repetitive movements, and significant variations in camera viewpoint, lighting, and worker behavior. Moreover, industrial action monitoring usually requires not only detecting that an action occurred, but also determining whether it was performed in the correct place, at the correct time, and in accordance with the regulation.

One common strategy to tackle these difficulties is to apply modern video-based action recognition models, which are specifically designed to capture spatio-temporal patterns from visual streams. Nevertheless, even modern approaches, encounter substantial obstacles in industrial protocol monitoring. First, such models often require large amounts of manually annotated video data, including action-level labels [1]. Second, the learned decision-making process is typically difficult to interpret [2]. Third, a change in the technological protocol may require additional data collection and model retraining [3]. These limitations are especially important in industrial applications, where expert verification, fault tolerance, and explainability are required.

In this paper, we propose an interpretable hybrid neural-symbolic system for SOP complience in industrial video streams. The main principle underlying the proposed approach is the separation of visual perception from semantic decisionmaking. A neural network module is used to detect and track key objects in the scene, such as workers, tools, equipment parts, and target objects. The resulting structured representation is then processed by a logical inference module, which evaluates spatial, temporal, and interaction-based conditions derived from the technological regulation. Instead of training a separate end-to-end action recognition model, the system relies on object detections, object trajectories, and explicit logical rules.

The proposed approach is evaluated on an applied case study involving monitoring workers' actions at a dairy farm on rotary milking parlor. The technological process consists of several stations, each corresponding to a specific stage of

milking routine. For each station, a separate object detection model is trained and the logical algorithm, is implemented. This design improves modularity and fault tolerance: updating the model or rules for one station does not affect the operation of the other stations.

The report presents the following results. First, we formulate the problem of regulated action monitoring in industrial video streams as a transformation of raw video into interpretable technological events. Second, we propose a hybrid neural-symbolic approach that combines object detection, object tracking, and logical inference. Third, we show how textual technological regulations can be represented as observable spatial-temporal rules. Finally, we demonstrate the applicability of the proposed system in a real industrial scenario and show that it can operate in real time.

Related works

Since the early 2010s, deep learning methods have led to substantial advances in image classification and object detection. However, automated video analysis remains considerably more challenging because it requires modeling temporal dynamics, object interactions, and the context in which activities occur. Depending on the required level of localization, video understanding tasks can be formulated in different way, such as action recognition or action detection.

Modern approaches to action recognition and action detection are often based on deep video models that learn spatio-temporal representations directly from annotated video data. One representative example is an improved Multiscale Vision Transformer architecture (MViTv2) proposed for image classification, video classification, and object detection [4]. This model uses a hierarchical multiscale representation and attention mechanisms to process visual information at different resolutions. Such architectures demonstrate high performance on standard benchmarks, but their application to industrial protocol monitoring is limited by the need for large-scale annotated datasets and by the lack of explicit interpretation of the generated decision.

Another important research direction is object-centric action recognition, where the action is recognized not only from the global video appearance, but also from the objects involved in the scene and their interactions. In [5], the authors propose an end-to-end framework that simultaneously performs object detection and interaction reasoning for object-centric action recognition. The method is based on the assumption that objects interacting with a person provide essential information for recognizing the performed action. This idea is close to industrial monitoring scenarios, where the correctness of an action often depends

on the interaction between a worker, a tool, a target object, and equipment elements. The importance of explicit object and hand positions for action recognition is also demonstrated in [6]. In this work, the authors consider egocentric videos recorded from a first-person viewpoint and recognize hand-related actions using detected hands and relevant objects. The method applies object detection and tracking techniques to obtain spatial trajectories of hands and objects, and then uses these trajectories for action classification. The recognized actions include simple manipulations such as taking, putting, washing, and stirring. The results show that the coordinates of hands and objects can be sufficiently informative for recognizing certain types of actions, even without using complex visual features.

The review [7] systematically categorizes approaches to Video-LLMs, in which video data are processed jointly with a language model: Video Analyzer × LLM, Video Embedder × LLM, and the hybrid Analyzer + Embedder × LLM architecture. The authors show that such models are capable of reasoning at different levels of granularity, including spatio-temporal analysis, video question answering, and event localization. However, the review also highlights several significant limitations of Video-LLMs, including the high computational cost of detailed video analysis, difficulties in processing long video sequences, insufficient reliability of spatio-temporal alignment, and the risk of hallucinations.

The work [8] addresses manufacturing procedure compliance by proposing the IFOGM model for SOP monitoring on an assembly line. The approach detects key objects via YOLO, determines their state, position, and quantity, and uses majority voting over frame sequences to classify operator motions. SOPs are represented as sequences of modular motions, such as pickup, place, and attach. However, IFOGM relies on state-graph checks and temporal smoothing rather than formal logical reasoning, preventing it from semantically recovering missed detections or offering causal explanations. Our hybrid system overcomes these limitations by separating perception from decision-making via formal spatio-temporal rules, providing full interpretability, straightforward rule updates, and robustness to detector errors.

These studies demonstrate that modern approaches can effectively use visual representations of workers, objects, their trajectories and interactions, and also incorporate temporal reasoning and linguistic representations to monitor compliance with the regulations. However, the models presented differ in how SOP requirements are presented and incorporated into the decision-making process. In the proposed approach, the technological procedure is explicitly represented as a set of spatio-temporal logical rules. Neural network models are responsible only

for visual perception, while the logical inference module evaluates the detected sequence.

Problem Statement

We consider the problem of automatic monitoring of SOP compliance in an industrial video stream. There is a video camera installed in the employee's work area to monitor his activities. The proposed Hybrid Neural-Symbolic System monitors the video stream coming from the surveillance camera and reports any SOP violations that occur.

Formally, the proposed approach involves dividing the task into the following subtasks: transforming the regulations into a set of formal logical rules and training an object detector in an image. The system's output is information signals about monitoring results, presented as target events.

Each frame may contain a worker, equipment, and an object with respect to which the worker performs regulated actions. As an example, Fig. 1 shows the frames of a routine milking procedure on a dairy farm was captured by a stationary camera installed at a workstation and facing the rotary milking platform. Cow, worker, udder, foam applicator or generator and hand are considered target objects.

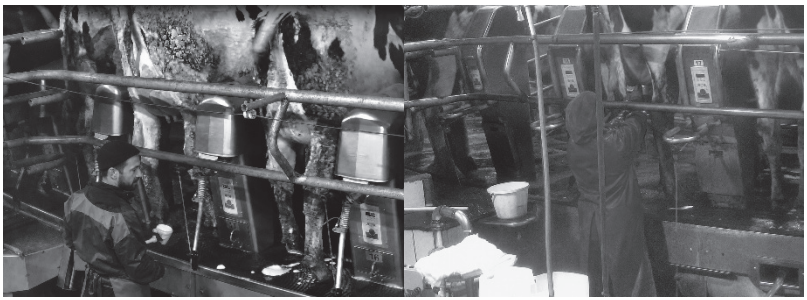


Fig. 1. Examples of camera angles from a dairy farm. On the left – workstation 1, on the right – workstation 2

The task is to determine, at each time moment, whether the worker has performed the required action on the next target object appearing in the frame.

Let us consider the time interval from $t = 1$ to $t = T$, where T is the last frame at the current moment. The input data are represented as a sequence of video frames $V = \{I_t\}_{t=1}^{T}$, where $I_t \in R^{H \times W \times 3}$ is the RGB image at time step t, H and W are the frame height and width, and T is the number of frames being processed.

The goal is to transform the input video stream into a sequence of semantic events and then determine whether the observed technological process satisfies SOP. Thus, the considered problem is formulated as the construction of a mapping F, which transforms a continuous video stream into a sequence of interpretable events:

$$F: V \to \left(\{e_t^i\}_{i=1}^{k_t}\right)_{t=1}^{T}. \quad (1)$$

Where e_t^i – the target events; k_t – the number of events at time t.

In this formulation, neural network models are responsible for visual perception, while logical inference is responsible for semantic interpretation and decision making. In addition, the system must provide an interpretation of the decision, explaining which observed objects, interactions, and temporal conditions led to the generated event.

Interpretable neuro-symbolic approach

We propose a hybrid approach based on object detection, object tracking, and logical inference. For each frame, events are generated in real time. Information obtained at the previous processing step is used at the next step for tracking, state updating, and decision making. The overall pipeline is shown in Fig. 2. The horizontal sequences of objects in the figure illustrate the continuous nature of the proposed algorithm. For each video frame, the system detects the target objects required for action analysis. Then, a tracking algorithm is applied to the detected objects. Each object receives a unique identifier, which is preserved from frame to frame while the object remains visible in the scene.

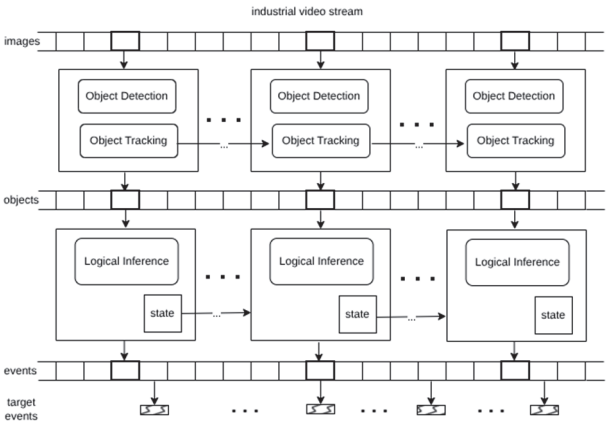


Fig. 2. The scheme of proposed method

The logical inference module has an internal state. This state accumulates information about object interactions observed during the previous time interval. For each new frame, the state is updated, and, if the required conditions are satisfied, an event is generated. Each event describes the semantic meaning of the performed action. The set of target events is defined by an expert according to SOP.

Neural Network-Based Object Detection and Tracking

The proposed system uses a neural network module to extract visual information from the input video stream. This module includes two main stages: object detection and multi-object tracking. The detector estimates the class, position, and confidence score of each target object in every video frame. The tracker then associates detections between consecutive frames and assigns a persistent identifier to each object while it remains visible in the scene. The proposed approach is not limited to a specific detection or tracking algorithm. In general, any object detector and any multi-object tracker can be used if they provide the required output: object class, bounding box coordinates, confidence score, and track identifier. This makes the system modular and allows the neural network component to be replaced without changing the logical inference module.

In the experimental implementation, we used a detector from the YOLO family [10], which is widely used for real-time object detection. In our experiments, the YOLO11n implementation was selected as the detector. YOLO-family models are widely used for real-time object detection because they provide a good balance between detection accuracy and computational efficiency. In the considered industrial scenario, this property is important because the system must process a continuous video stream and detect small moving objects, such as hands, tools, and parts of the equipment.

For multi-object tracking, the ByteTrack algorithm was used [9]. ByteTrack is based on the tracking-by-detection paradigm. Its important feature is that it uses not only high-confidence detections, but also low-confidence detections during the association stage. This helps to preserve object trajectories in cases of partial occlusion, motion blur, or temporary decrease in detector confidence. Such situations are typical for industrial video streams, where the worker's hands, tools, animal body parts, and equipment may overlap in the image.

The output of the neural network module is a structured sequence of tracked objects. For each frame, the system forms a set of records containing the object class, bounding box coordinates, confidence score, and track identificator.

Let $\mathcal{C} = c_1, c_2, \dots, c_m$ be the set of object classes required for action analysis. For each frame I_t, an algorithm produces a set of detected objects:

$$D_t = \{d_t^i\}_{i=1}^{n_t} \quad (2)$$

$d_t^i = \left(b_t^i, c_t^i, q_t^i, s_t^i\right)$ – each detection; $b_t^i = \left(x_t^i, y_t^i, w_t^i, h_t^i\right)$ – the bounding box of the object; $c_t^i \in \mathcal{C}$ – the class name; $q_t^i \in \mathbb{N}$ – the tracking identifier (ID); $s_t^i \in [0,1]$ – the confidence score.

Logical Inference Module

Let us consider the task of creating logical rules and their further processing in order to generate target events. The SOP is described in text form in special documents. An excerpt from the SOP governing the milking routine at the first workstation reads as follows: «A worker must be present at the workstation and perform the prescribed preparation procedure for each cow. The worker must apply foam to the udder using a handheld foam sprayer and then forestrip three to four streams of milk.» Next, the protocol is analyzed and a list of objects $\mathcal{C} = c_1, c_2, \ldots, c_m$ is selected for detection by the neural network algorithm. At this stage of the study, this procedure was performed manually. In the future, SOP processing will be performed using AI and named entity extraction algorithms. For milking routine, such classes are cow, udder, worker, foam sprayer, hand. Only the hand class wasn't directly extracted from the protocol. However, it's no problem for the AI model to understand that the worker is milking by hand.

The proposed inference technology is based on the mivar approach [11]. As a result, a template rule base is built, containing checks such as «intersect», «touch», «is», «connect». At this stage, this is done manually. The model of the subject area is built in spatio-temporal space.

The MIVAR rule-representation model is defined over a set of parameters linked by production rules. Each rule specifies a set of input parameters and a single output parameter. During logical inference, a rule is activated when values are available for all its input parameters. Rule activation produces a value for the output parameter, which may, in turn, enable subsequent rules. This process continues until the target parameter is derived or no further rules can be activated. The output of the algorithm is a generated event indicating the result of the action assessment. An important feature of the proposed method is that it does not require a separate and complex knowledge-engineering stage. At the current stage, rule templates for the knowledge base are largely constructed manually. However, when the approach is deployed at additional workstations or facilities, previously developed templates can be reused and adapted, thereby reducing the knowledge-engineering effort.

The proposed approach includes a base of logical rule templates $P = (R, \Theta)$, where R is the set of rules: R_1 – foam sprayer is, R_2 – foam sprayer touch, R_3 – hand touch, R_4 – cow is, R_5 – worker is, R_6 – hand is; Θ – customizable numerical rule modifiers, such as time interval or distance. The set of rule parameters consists of parameters corresponding to different classes and their spatial characteristics (bounding boxes), object state parameters, and target events. In accordance with Eq. (1), target events are set as $E = \{e_i\}_{i=1}^{n_t}$. An excerpt from the knowledge base P is provided in Table 1. From here on, x denotes the input parameters of the rule, and y denotes the output parameters.

Table 1

Rule knowledge base excerpt

hand	hand x	hand y	foam	foam x	foam y	state1	state2	event1
x	x	x				y		
			x	x	x	x	y	
						x	x	y

The knowledge rule base includes the selection of target objects, working zones, allowed time intervals, required object interactions, and the order of actions. Depending on the camera viewpoint and the level of visual detail available in the video stream, some regulatory requirements can be simplified and represented through observable spatial-temporal conditions. For example, in a dairy-farm scenario, the requirement to forestrip several drops of milk before milking can be approximated by the requirement that the worker's hand must approach the cow udder and remain near it for a specified time interval. Some rules connect low-level visual observations, such as object positions and trajectories, with high-level semantic events used for assessing the correctness of the operator's actions.

At the next stage, a logical inference chain is generated for the next frame. Each rule from the knowledge base associated with a specific class is enriched with the ID and farm number and duplicated. Thus, each rule with the active "cow" parameter is repeated in the set of logical rules for as many cows as were detected by the detector. Rules from the previous inference steps are also added to the set to account for temporal characteristics.

A target event is generated when the object leaves the visible area or a predefined region, or when the technological operation is completed. The target event e_i^t contains, for example, the following information: cow ID, during the interval

from t_{start} to the current moment, received the RED status. This means that a violation of the regulation occurred.

The proposed logical inference algorithm is based on the mivar approach and is specifically designed for computer vision systems while accounting for spatiotemporal characteristics. This paper presents the algorithm at a high level as a component of the proposed hybrid framework.

Experimental Evaluation on an Applied Case Study

The model quality evaluation was conducted on a task involving monitoring workers' actions at a dairy farm. The farm workflow consists of a series of stations, each responsible for one stage of cow processing according to operational regulations. It should be noted that the same station may differ across farms, for example in the number of workers (one or two people per station), cow treatment tools (e.g., a foam sprayer held in hand), camera angle, lighting conditions, distance to the rotary platform with cows, and processing protocols, all of which are reflected in the logical rules and the neural network.

Training one model for a single station requires, on average, 500 annotated images for the training set and 150 for the validation set, which is remarkably small for a task of this complexity. Video frames have a resolution of 2304x1296, but are subsequently resized to 640x640 pixels to accelerate training and remove redundant information. Various data augmentation strategies are applied during training.

A separate YOLO11n model is trained for each station over 150 epochs to perform object detection (cow, person, foam sprayer, towel).

The results of performance measurements (Table 2), what confirms real-time operation on edge devices. Table 3 shows the quality metrics of the trained YOLO models for each post on test data.

Table 2

YOLOv11 performance

Metric	Value
Average processing time per frame	10 ms
FPS (limited by video frame rate)	24
Latency between the actual action and the generated event	None (due to the proposed problem formulation approach)
Video memory consumption	1.5 GB

Table 3

YOLOv11 metrics on individual stations

№ station	Precision	Recall	mAP50	mAP50-95
1	0.9256	0.86149	0.92224	0.71279
2	0.84388	0.82826	0.84559	0.60266
3	0.91215	0.90214	0.91486	0.68043

For a comprehensive evaluation of the entire system, we constructed a dedicated benchmark. The benchmark comprises two video recordings, each 6 hours in duration, which were annotated by an expert. The annotation specifies the type of violation for each cow and the timestamps when the cow leaves the camera's field of view. The time range is used to calculate the metrics due to the difference in reaction speed between the expert and the computational system. The benchmark contains records with different workers, which affects the visibility of the detected objects (e.g., a tall worker may occlude the towel in their hands) and the way of performing the protocol (one worker prefers wiping with the left hand, while another uses the right). Table 4 shows the metrics for evaluating the entire system based on the prepared benchmark.

Table 4

System metrics on individual stations

№ station	Precision	Recall	F1-score
1	0.99906	0.99688	0.99797
2	0.99945	0.99864	0.99905
3	0.97854	0.96567	0.97207

An experimental study has shown that a hybrid approach using logical inference makes it possible to obtain high-quality systems. The logical rules made it possible to expand the frame-by-frame model to full-fledged video processing, taking into account space-time components without additional computational cost. The obtained results confirm the practical applicability of the developed solution in an industrial environment.

Conclusion

The proposed approach has several important advantages. First, it does not require annotation of all frames in the video stream. Instead, it is sufficient to

annotate a limited number of representative frames for training the object detection models. Moreover, no separate action-level annotation is required. The action is determined according to the technological regulation, which is formalized as a set of logical rules.

Another important advantage is interpretability. The use of logical rules makes it possible to obtain decisions that can be explained in terms of detected objects, their positions, interactions, and temporal relations. Since the expert knowledge is already described in the enterprise technological documentation, the proposed approach does not require a separate knowledge-engineering stage, which is often a bottleneck in the development of classical expert systems.

Unlike heavy video models prone to hallucinations or rigid state-graph systems limited to temporal smoothing, the proposed approach strictly separates visual perception from decision-making via formal spatio-temporal rules. This modular architecture ensures efficient real-time execution on edge devices and enables instant adaptation to regulatory changes through rule updates, eliminating the need for neural network retraining. It is worth noting that formal logical reasoning allows the system to semantically recover missed detections and offer clear causal explanations for its decisions.

Thus, the proposed hybrid neural-symbolic approach combines the advantages of neural network-based visual perception and rule-based logical reasoning. Neural networks provide robust detection and tracking of objects in the video stream, while logical rules ensure transparent decision making based on the technological protocol. This reduces the need for costly action annotation, simplifies adaptation to specific industrial scenarios, and allows the system to generate interpretable events describing whether the regulated action was performed correctly, with violations, or was not performed.

References

1. Qian Y., Kargarandehkordi A., Sun Y., Azizian P., Mutlu O.C., Surabhi S., Jabbar Z., Wall D.P., Washington P., Chen H. Hashtag2Action: Data Engineering and Self-Supervised Pre-Training for Action Recognition in Short-Form Videos // Proceedings of the IEEE/CVF International Conference on Computer Vision (ICCV) Workshops. 2025. P. 2986–2996.

2. Lee J., Lee W., Park G.-M., Kim S.T., Choi J. PCBEAR: Pose Concept Bottleneck for Explainable Action Recognition // Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition Workshops (CVPRW). 2025. P. 2681–2690. DOI: 10.1109/CVPRW67362.2025.00253.

3. Wu T., Ge S., Li J., Chen X., Li L., Wang L. Aligning video regions with action descriptions for open-vocabulary spatio-temporal action detection // Computer Vision and Image Understanding. 2026. Vol. 270. Art. 104825. DOI: 10.1016/j.cviu.2026.104825.

4. Li Y., Wu C.-Y., Fan H., Mangalam K., Xiong B., Malik J., Feichtenhofer C. MViTv2: Improved Multiscale Vision Transformers for Classification and Detection // Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). 2022. P. 4804–4814.

5. Li X., Sun P., Liu Y., Duan L., Li W. Simultaneous Detection and Interaction Reasoning for Object-Centric Action Recognition // IEEE Transactions on Multimedia. 2025. Vol. 27. P. 5283–5295. DOI: 10.1109/TMM.2025.3543033.

6. Kapidis G., Poppe R., van Dam E., Noldus L.P.J.J., Veltkamp R.C. Egocentric Hand Track and Object-Based Human Action Recognition // Proceedings of the 2019 IEEE SmartWorld, Ubiquitous Intelligence & Computing, Advanced & Trusted Computing, Scalable Computing & Communications, Cloud & Big Data Computing, Internet of People and Smart City Innovation (SmartWorld/SCALCOM/UIC/ATC/CBDCom/IOP/SCI). 2019. P. 922–929. DOI: 10.1109/SmartWorld-UIC-ATC-SCALCOM-IOP-SCI.2019.00185.

7. Tang Y., Bi J., Xu S., Song L., Liang S., Wang T., Zhang D., An J., Lin J., Zhu R., Vosoughi A., Huang C., Zhang Z., Liu P., Feng M., Zheng F., Gaudiot J.L., Luo P., Luo J., Xu C. Video Understanding with Large Language Models: A Survey // IEEE Transactions on Circuits and Systems for Video Technology. 2026. Vol. 36. No. 2. P. 1355–1376. DOI: 10.1109/TCSVT.2025.3566695.

8. Wang K.-J., Liu S.-H., Hsu Y.-L. Smart worker guidance: A deep learning model of standard operation procedures compliance for flexible assembly // The International Journal of Advanced Manufacturing Technology. 2026. Vol. 144. P. 5963–5977. DOI: 10.1007/s00170-026-18174-7.

9. Zhang Y., Sun P., Jiang Y., Yu D., Weng F., Yuan Z., Luo P., Liu W., Wang X. ByteTrack: Multi-Object Tracking by Associating Every Detection Box // Computer Vision – ECCV 2022: 17th European Conference on Computer Vision, Tel Aviv, Israel, October 23-27, 2022, Proceedings. Part XXII. Cham: Springer, 2022. P. 1–21. DOI: 10.1007/978-3-031-20047-2_1.

10. Redmon J., Divvala S., Girshick R., Farhadi A. You Only Look Once: Unified, Real-Time Object Detection // Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). 2016. P. 779–788. DOI:10.1109/CVPR.2016.91.

11. Varlamov O. Mivar: Transition from Productions to Bipartite Graphs Mivar Nets and Practical Realization of Automated Constructor of Algorithms Handling More than Three Million Production Rules [Electronic resource]. 2011. URL: https://arxiv.org/abs/1111.1321 (date of request: 11.06.2026).

С.С. ГРОМОВОЙ[1], А.Г. АРУТЮНЯН[1], В.В. АНДРУЛИС[1], А.В. ГУБА[1], Н.А. КОВАЛЁВ[1], В. ХАЛИД[1], М.Ю. ЛЕВИЧЕВ[1], В.Б. КАЗАНЦЕВ[1,2,3]

[1] Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный
[2] Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
[3] Центральный научно-исследовательский и опытно-конструкторский институт робототехники и технической кибернетики, Санкт-Петербург
gromovoi.ss@phystech.edu

ТРЁХМЕРНЫЙ ГАУССОВ СПЛАТТИНГ ДЛЯ СИНТЕЗА ЭГОЦЕНТРИЧЕСКИХ ИЗОБРАЖЕНИЙ В МАНИПУЛЯЦИОННЫХ ЗАДАЧАХ ГУМАНОИДНЫХ РОБОТОВ

Предложен метод калибровки 3DGS-реконструкции объекта относительно эгоцентрических поз Unitree G1. Метрический масштаб и ориентация по гравитации восстанавливаются по опорному размеру, а виртуальная камера задаётся по внутренним параметрам, IMU и глубине. Метод оценён на 70 реальных кадрах дверной ручки в десяти запусках с повторной выборкой данных. Точность быстро насыщается, а разброс сопоставим с различиями режимов, поэтому эффект аугментации на данном бенчмарке неразрешим.

Ключевые слова: *эгоцентрическое зрение, трёхмерный гауссов сплаттинг, синтетическая аугментация, обнаружение объектов, гуманоидные роботы, перенос из симуляции в реальность.*

Введение

Обучаемые визуальные детекторы позволяют гуманоидным сервисным роботам взаимодействовать с дверями, выключателями и другой повседневной инфраструктурой. Камера на движущемся корпусе формирует эгоцентрическое изображение, поэтому ракурс обучения должен соответствовать тому, что робот наблюдает при выполнении действия [1–3]. Для дверной ручки вид объекта определяется траекторией подхода, наклоном головы и расстоянием до двери, а сбор и ручная разметка таких кадров требуют значительных затрат.

Трёхмерный гауссов сплаттинг (3DGS) обеспечивает быстрый синтез новых ракурсов [4]. В робототехнике сплаты применяются для генерации

демонстраций, моделирования и построения наборов изображений [5–9]; более крупные платформы реконструируют целые среды [10], а методы эгоцентрической генерации повышают устойчивость манипуляционных политик к ракурсу [11]. При этом прежние методы обычно выбирают объектно-центрированные камеры независимо от конкретного робота. Известный разрыв между синтетическими и реальными данными [12, 13] делает особенно важной проверку на реальных кадрах.

Полноцикловые симуляционные платформы, в частности Genie Sim 3.0 [10], объединяют реконструкцию целых сред с помощью 3DGS при поддержке лидара, генерацию сцен на основе больших языковых моделей и массовый сбор синтетических данных для гуманоидных роботов. Такие платформы и наш метод занимают разные позиции в спектре затрат и возможностей: платформа реконструирует и симулирует целые среды для масштабного обучения и оценки политик, тогда как наша процедура за несколько минут калибрует сплат одного объекта, полученный по съёмке смартфоном, относительно измеренного эгоцентрического распределения поз конкретного робота и предназначена для быстрой адаптации детектора к отдельному объекту инфраструктуры. Подходы дополняют, а не заменяют друг друга; контролируемое сравнение потребовало бы переноса нашей задачи и среды в реконструкционный и симуляционный конвейер платформы и оставлено на будущее.

В работе предложена процедура, которая связывает сплат, полученный по непостановочной съёмке, с эгоцентрическим распределением поз Unitree G1, заданным по бортовым измерениям и вручную выбранному азимуту. Реконструкция переводится в метрическую систему координат, выровненную по гравитации, а камера настраивается по внутренним параметрам, IMU и датчику глубины. Вклад включает саму калибровку, оценку с повторной выборкой данных и контрольный эксперимент, подтверждающий необходимость контекста сцены для объекта, сливающегося с фоном.

Постановка задачи

Целевая задача состоит в обнаружении матовой белой дверной ручки длиной около 30 см на белой двери по кадрам RGB-D-камеры гуманоида Unitree G1. Требуется получить синтетические эгоцентрические изображения из объектного сплата, заданного в произвольной системе координат. Искомое решение должно восстановить метрический масштаб и направление гравитации, воспроизвести измеренные параметры камеры

и диапазон поз подхода, сохранить контекст двери и не допустить пересечения обучающей и валидационной выборок.

Качество оценивается на 70 отложенных реальных кадрах метрикой mAP@50. Основной вопрос – изменяет ли добавление откалиброванных синтетических кадров качество по сравнению с обучением только на реальных данных. Поскольку результат зависит от инициализации сети и состава малого подмножества, оба источника случайности должны повторно выбираться в каждом запуске.

Метод

Процедура включает реконструкцию сцены, калибровку и обучение детектора (рис. 1). Короткое видео обхода ручки снималось смартфоном; позы восстанавливались методом SfM в COLMAP, а 3DGS обучался средствами splatfacto в Nerfstudio [14]. После удаления артефактов число гауссиан уменьшилось со 143 600 до 82 942.

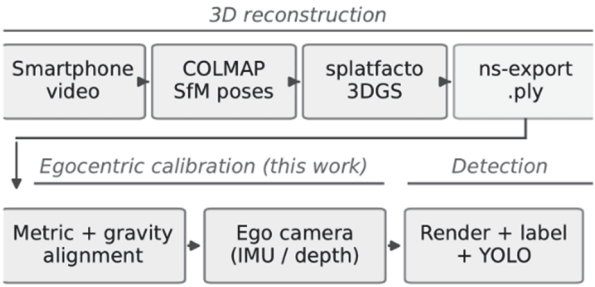


Рис. 1. Схема процедуры: 3D-реконструкция, метрическая и гравитационная калибровка, настройка эгоцентрической камеры и обучение детектора

Масштаб определялся по известной длине ручки: 0,41 единицы сцены соответствовали 0,30 м, поэтому использовался коэффициент 0,7317. Сцену вручную поворачивали до вертикального положения двери и горизонтального пола, поскольку автоматическое выделение плоскостей было неустойчивым. Анализ главных компонент точек двери дал нормаль (0,958; 0,003; 0,287), подтвердив почти горизонтальное направление нормали. Преобразования выполнялись штатными операциями редактора сплатов, чтобы согласованно изменить координаты, кватернионы и зависящий от обзора цвет.

Внутренние параметры камеры при разрешении 640×480 составляли 605,8 и 605,2 по фокусным координатам и 329,3 и 244,8 по координатам главной точки. По трём бортовым записям IMU получен устойчивый наклон камеры вниз 11,4°. По потоку глубины измеренный диапазон расстояний от двери при реальном подходе составлял 0,9-1,4 м. Прямолинейная траектория не восстановилась методом SfM из-за недостаточного параллакса, поэтому распределение описывалось статистически. Азимут этими измерениями не определялся: центральное направление 157° выбрано вручную так, чтобы ручка была обращена к камере; это выбранный, а не измеренный параметр.

Для синтетического набора вокруг выбранного направления задавались азимут 157°±15°, высота камеры 0,10–0,20 м над ручкой и расстояние от двери 0,7–1,3 м; кадры фильтровались по яркости, контрасту и лапласианной резкости. На расстояниях свыше примерно 1,4 м рендеринг деградировал с появлением плавающих артефактов. Частично поэтому синтетический диапазон расстояний был смещён ближе относительно измеренного реального диапазона 0,9–1,4 м и не охватывал его дальнюю часть; это несоответствие могло вносить вклад в остаточный разрыв между синтетическими и реальными изображениями.

Псевдоразметка ограничивающих рамок выполнялась Qwen3-VL-8B в 4-битном режиме. Координаты модели в нормированной шкале 0–1000 пересчитывались в пиксели; систематически вытянутые по вертикали рамки исправлялись вручную. Разметка 70 валидационных кадров была проверена вручную. Реальный обучающий пул содержал 238 кадров после содержательной дедупликации относительно валидации, дополнительно проверенной хешированием изображений.

Детектор YOLOv8-nano [15] обучался 60 эпох при 640×480 в полной точности; автоматическая смешанная точность не использовалась из-за зависания целевого GPU. Применялись умеренные фотометрические и малые геометрические возмущения, без агрессивной мозаики и сильного масштабирования. YOLOv8-nano выбран как компактная, широко воспроизводимая базовая модель; исследуемая процедура калибровки не зависит от выбора детектора. Проверка YOLO11-nano по тому же протоколу в пяти запусках сохранила знаки разностей между реальным и гибридным режимами при каждом бюджете, а средняя mAP@50 отличалась от YOLOv8 не более чем на 0,04, что эмпирически подтверждает эту независимость.

Эксперименты и результаты

В основном эксперименте использовались 0, 10, 25, 50 и 100 % реального пула, то есть 0, 24, 60, 119 и 238 кадров. Для каждого бюджета сравнивались обучение только на реальных данных и гибридный режим с синтетическими изображениями. Для каждой доли выполнено десять независимых запусков с новой инициализацией сети и новой подвыборкой реальных кадров (рис. 2).

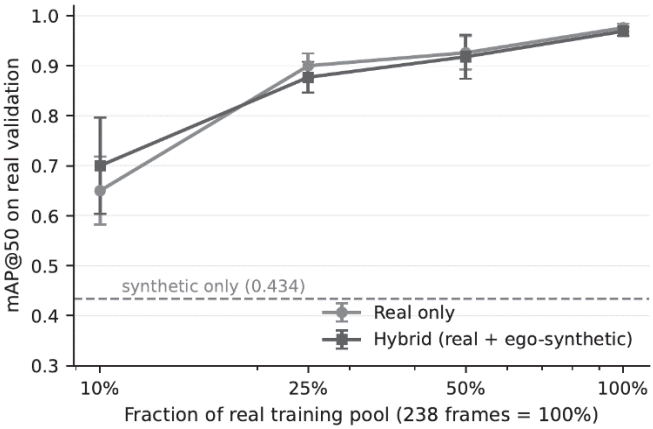


Рис. 2. mAP@50 на 70 реальных кадрах в зависимости от объёма реального обучающего пула; показаны среднее и стандартное отклонение по десяти запускам

Точность быстро насыщалась: 60 кадров дали среднюю mAP@50 0,90, половина пула – 0,93, весь пул – 0,976. Планки погрешностей перекрывались при всех долях. Средняя парная разность между гибридным и реальным режимами составляла +0,05±0,07 при 10 %, –0,02±0,02 при 25 % и –0,01±0,01 при 100 %. При 10 % значение реального режима менялось между запусками от 0,58 до 0,76, то есть разброс был шире различий между режимами; сравнение на одном разбиении могло бы показать различие любого знака. Более ранний эксперимент с пятью запусками указывал на снижение дисперсии гибридного режима при полном бюджете, однако на итоговом протоколе с десятью запусками и дедуплицированным пулом этот эффект не воспроизвёлся: стандартные отклонения равны 0,008 и 0,009. Поэтому вывод о влиянии на дисперсию не делается. Детектор, обученный только на синтетических данных, достиг

0,434. Следовательно, на данном насыщенном бенчмарке нельзя установить ни пользу, ни вред аугментации.

Качество псевдометок дало отчётливый эффект: их ручное исправление повысило mAP@50 с 0,258 до 0,434, а mAP, усреднённую по порогам IoU 0,5–0,95, – с 0,087 до 0,28. Ранняя версия эксперимента по бюджетам использовала неисправленные метки и показывала ухудшение при малых долях реальных данных; этот кажущийся эффект был в значительной мере следствием качества аннотаций, а не свойством синтетических изображений. Поэтому ошибку разметки легко принять за свойство синтетических данных. Качественный перенос между исходной съёмкой, синтетическим рендером и кадром робота показан на рис. 3.

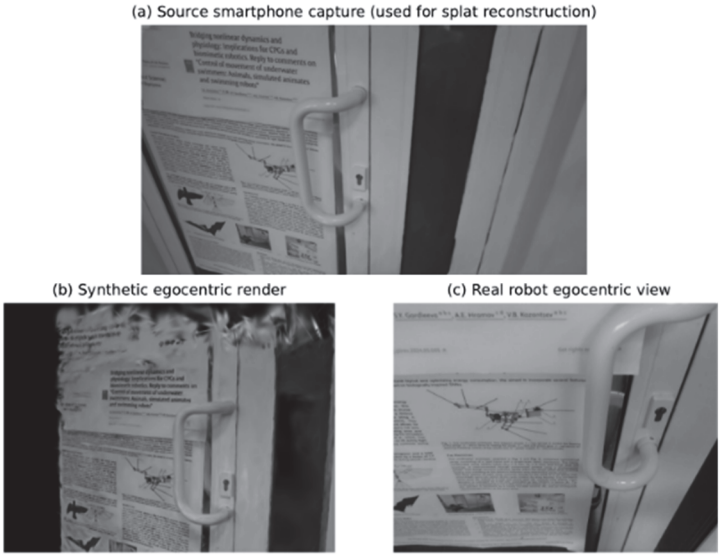


Рис. 3. Исходная съёмка смартфоном (a), синтетическое эгоцентрическое изображение из откалиброванного сплата (b) и реальный кадр камеры робота (c)

Контрольный эксперимент подтвердил необходимость контекста сцены. Для белой ручки на белой двери вырезание объекта и вставка в случайные фоны дали mAP@50 0,024, тогда как рендеринг той же ручки внутри реконструированной двери – 0,434. Контекст здесь является частью

визуального признака; контроль не рассматривается как сравнение с сильным альтернативным методом.

Обсуждение и ограничения

Калибровка связывает произвольную систему координат реконструкции с физически заданной позой робота и воспроизводит геометрию его подхода. Однако бенчмарк содержит одну дверь, один крупный неподвижный объект и 70 валидационных кадров. Насыщение и вариация подвыборки не позволяют оценить эффект аугментации; сравнение на одном разбиении могло бы показать различие любого знака. Поэтому основной эмпирический вывод относится к протоколу оценки, а не к приросту качества.

Ограничения метода включают рендеринг только в ближней зоне, ручное выравнивание по гравитации и ручное исправление псевдометок. Синтетический диапазон расстояний от двери 0,7–1,3 м смещён ближе измеренного реального диапазона 0,9–1,4 м и не охватывает его дальнюю часть. Траектория подхода описана статистически, а не восстановлена явно.

Дополнительное ограничение – отсутствие проверки на открытых бенчмарках. Метод требует парного входа, которого доступные наборы пока не предоставляют: пригодной для реконструкции сплата съёмки целевого объекта вместе с телеметрией поз – наклоном по IMU и расстояниями подхода по глубине – именно того робота, который будет встречать этот объект. Открытые эгоцентрические корпуса, такие как Ego4D [3], не содержат ни исходных материалов для реконструкции, ни телеметрии робота, а открытые сцены 3DGS не связаны с конкретной робототехнической платформой. Чтобы дать другим возможность сравнения, мы публикуем данные о дверной ручке – реальные кадры робота с проверенными аннотациями, реконструированный сплат и синтетические эгоцентрические изображения с исходными псевдометками и исправленными аннотациями, позволяющими воспроизвести эксперимент о влиянии качества разметки, – как парный бенчмарк аугментации, откалиброванной под конкретного робота: DOI 10.5281/zenodo.21431029.

Наиболее перспективна проверка на задачах с дефицитом реальных данных и выраженной зависимостью обнаружимости от угла и расстояния. Съёмка собственной RGB-D-камерой робота может автоматизировать метрическую и гравитационную калибровку и расширить допустимый диапазон поз. Для достоверного сравнения необходимы повторная выборка данных, несколько случайных запусков и задача с реальным запасом для улучшения.

Заключение

Предложен метод калибровки объектного 3DGS относительно эгоцентрического распределения поз Unitree G1, заданного по бортовым измерениям и вручную выбранному азимуту. Метод восстанавливает метрическую систему координат, выровненную по гравитации, и задаёт виртуальную камеру по внутренним параметрам, IMU и глубине. На задаче обнаружения дверной ручки синтетические изображения воспроизвели геометрию подхода, но эффект аугментации оказался неразрешим из-за насыщения и вариации подвыборки. Результат позиционируется как метод и ограничение на его оценку, а не как утверждение о приросте качества.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации. Конвейер эгоцентрического рендеринга на основе гауссовского сплаттинга разработан в рамках государственного задания, проект № FSMG-2025-0070; анализ данных и интерпретация результатов поддержаны проектом № FSMG-2024-0047. Набор реальных кадров собран на платформе Unitree G1 в рамках робототехнической программы лаборатории.

Список литературы

1. Betancourt A., Morerio P., Regazzoni C.S., Rauterberg M. The evolution of first person vision methods: A survey // IEEE Transactions on Circuits and Systems for Video Technology. 2015. Vol. 25. No. 5. P. 744–760. DOI: 10.1109/TCSVT.2015.2409731.

2. Núñez-Marcos A., Azkune G., Arganda-Carreras I. Egocentric vision-based action recognition: A survey // Neurocomputing. 2022. Vol. 472. P. 175–197. DOI: 10.1016/j.neucom.2021.11.081.

3. Grauman K. et al. Ego4D: Around the world in 3000 hours of egocentric video // IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2022. P. 18995–19012. DOI: 10.1109/CVPR52688.2022.01842.

4. Kerbl B., Kopanas G., Leimkühler T., Drettakis G. 3D Gaussian splatting for real-time radiance field rendering // ACM Transactions on Graphics. 2023. Vol. 42. DOI: 10.1145/3592433.

5. Yang S., Yu W. et al. Novel demonstration generation with Gaussian splatting enables robust one-shot manipulation // Robotics: Science and Systems. 2025. DOI: 10.48550/arXiv.2504.13175.

6. Qureshi M.N., Garg S., Yandun F., Held D., Kantor G., Silwal A. SplatSim: Zero-shot sim2real transfer of RGB manipulation policies using Gaussian splatting // IEEE International Conference on Robotics and Automation. 2025. DOI: 10.48550/arXiv.2409.10161.

7. Vanherle B. et al. Cut-and-Splat: Leveraging Gaussian splatting for synthetic data generation // International Conference on Robotics, Computer Vision and Intelligent Systems. 2025. DOI: 10.48550/arXiv.2504.08473.

8. Meyer L., Erich F., Yoshiyasu Y., Stamminger M., Ando N., Domae Y. PEGASUS: Physically enhanced Gaussian splatting simulation system for 6DoF object pose dataset generation // IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems. 2024. P. 10710-10715. DOI: 10.1109/IROS58592.2024.10802037.

9. Deogan A., Beks W., Teurlings P., de Vos K., van den Brand M., van de Molengraft R. Synthetic dataset generation for autonomous mobile robots using 3D Gaussian splatting for vision training. arXiv:2506.05092. 2025. DOI: 10.48550/arXiv.2506.05092.

10. Yin C., Huang D., Yang D. et al. Genie Sim 3.0: A high-fidelity comprehensive simulation platform for humanoid robot. arXiv:2601.02078. 2026. DOI: 10.48550/arXiv.2601.02078.

11. Xu Y., Yang J., Wang X., Chen Y., Zhu Z. et al. EgoDemoGen: Egocentric demonstration generation for viewpoint generalization in robotic manipulation. arXiv:2509.22578. 2025. DOI: 10.48550/arXiv.2509.22578.

12. Tremblay J., Prakash A., Acuna D. et al. Training deep networks with synthetic data: Bridging the reality gap by domain randomization // IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition Workshops. 2018. P. 969–977. DOI: 10.1109/CVPRW.2018.00143.

13. Tobin J., Fong R., Ray A., Schneider J., Zaremba W., Abbeel P. Domain randomization for transferring deep neural networks from simulation to the real world // IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems. 2017. P. 23–30. DOI: 10.1109/IROS.2017.8202133.

14. Tancik M., Weber E., Ng E. et al. Nerfstudio: A modular framework for neural radiance field development // ACM SIGGRAPH Conference Proceedings. 2023. DOI: 10.1145/3588432.3591516.

15. Jocher G., Chaurasia A., Qiu J. Ultralytics YOLO. Software repository. 2023. URL: https://github.com/ultralytics/ultralytics.

Секция

Нейронные сети в математическом моделировании и управлении

А.С. НОСОВ, Н.Т. ГАБДРАХМАНОВА
Математический институт им. С.М. Никольского
Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы
gabdrakhmanova-nt@rudn.ru

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ И НЕЙРОСЕТЕВЫХ МОДЕЛЕЙ В ЗАДАЧАХ ОЦЕНКИ VALUE-AT-RISK НА РОССИЙСКОМ РЫНКЕ

В работе сравниваются классическая модель GARCH (1,1) и нейросетевая модель на базе стохастических дифференциальных уравнений (Neural SDE) для расчета Value-at-Risk (VaR). Исследование проведено на данных индекса IMOEX и пары USD/RUB за период 2024-2026гг. Показано, что на небольших выборках дневных данных модель GARCH работает стабильнее и точнее предсказывает волатильность. Нейросетевая модель требует дополнительной калибровки масштаба волатильности, чтобы её прогнозы риска соответствовали реальности. Проведён сравнительный анализ эффективности классической модели GARCH(1,1), архитектуры Neural SDE и гибридного подхода GARCH-Neural SDE. Показано, что на дневных данных локального рынка параметрическая спецификация демонстрирует большую робастность, а перспективы непараметрических методов связаны с адаптацией к структурным сдвигам и интеграцией внешних регрессоров.

Ключевые слова: *Value-at-Risk, GARCH, Neural SDE, стохастические дифференциальные уравнения, риск-менеджмент, волатильность.*

Введение

Оценка рыночных рисков посредством показателя Value-at-Risk (VaR) традиционно опирается на параметрические модели семейства ARCH/GARCH [1], эффективно описывающие кластеризацию волатильности. Однако их применение сопряжено с методологическими ограничениями: жесткая аналитическая форма не учитывает сложные нелинейные эф-

факты, усреднение исторических шоков снижает устойчивость оценок в периоды структурных разрывов, а предположение о нормальности распределения остатков требует дополнительных модификаций для учета асимметричных реакций рынка. В связи с этим актуальной научной проблемой становится поиск баланса между статистической устойчивостью классических подходов и адаптивностью непараметрических методов на локальных рынках с ограниченным объемом наблюдений.

Альтернативным направлением выступает архитектура Neural SDE, где параметры стохастического дифференциального уравнения Ито [7] аппроксимируются нейронными сетями. В последние годы появились исследования, успешно интегрирующие нейросетевые блоки в параметрические модели, например архитектура GarchNet [4] или гибридные подходы на базе LSTM [2]. Однако данные работы преимущественно ориентированы на большие массивы данных и фокусируются на улучшении точечных прогнозов. В отличие от них, новизна нашего подхода заключается в применении чистой и гибридной архитектуры Neural SDE к дневным данным развивающегося рынка. Ключевым отличием является акцент на проблеме посткалибровки диффузионного члена для обеспечения статистической валидности VaR на малых выборках, что не рассматривается в [4]. Применимость Neural SDE к дневным рядам локальных рынков, а также сравнительная эффективность чистых и гибридных архитектур в задачах калибровки VaR остаются малоизученными, что обуславливает цель настоящего анализа.

Данные

В качестве исходной информации для анализа использовались дневные цены закрытия котировок индекса МосБиржи (IMOEX) и валютной пары доллар США/рубль (USD/RUB) за период с 01.01.2024 по 03.05.2026. Общий объем выборки составляет порядка 500–600 наблюдений по каждому активу. Исходные ценовые ряды преобразовывались в логарифмические доходности: $r_t = ln(\frac{P_t}{P_{t-1}})$, что обеспечивает стационарность ряда и упрощает последующие вычисления. Для обеспечения сходимости алгоритмов оптимизации нейросетевой архитектуры исходные признаки масштабировались до нулевого математического ожидания и единичной дисперсии. В качестве входных признаков для всех моделей использовались лагированные доходности r_{t-1}. Для оценки качества прогноза волатильности вычислялась реализованная волатильность как скользящее стандартное отклонение доходностей за окно 5 дней: $\sigma_{real,t} = \sqrt{\frac{1}{5}\sum_{i=1}^{5} r_{t-i}^2}$.

Постановка задачи и описание алгоритма

В рамках настоящего исследования ставится цель провести сравнительный анализ эффективности параметрической модели GARCH (1,1) и непараметрической архитектуры Neural SDE применительно к задаче оценки Value-at-Risk на примере российских финансовых активов, в частности индекса IMOEX и валютной пары USD/RUB. Объектом исследования выступают дневные временные ряды доходностей указанных инструментов за период 2024–2026 гг., а предметом – методы прогнозирования условной волатильности и оценки хвостовых рисков, основанные на сочетании стохастического моделирования и аппарата глубокого обучения. При формулировании требований к искомому решению необходимо обеспечить высокую точность прогноза волатильности, что достигается минимизацией ошибок предсказания реализованной волатильности посредством метрик RMSE и QLIKE. Не менее важным условием является статистическая валидность получаемых оценок риска: прогнозируемый уровень VaR должен удовлетворять условиям теста Купеца при уровне значимости $\alpha = 0{,}05$, обеспечивая частоту пробоев, соответствующую заявленной доверительной вероятности 99 %. Алгоритм должен сохранять работоспособность на ограниченных выборках объемом порядка 500–600 наблюдений. Дополнительно требуется робастность модели к структурным сдвигам и наличию экстремальных значений в обучающей последовательности, что предотвращает как чрезмерную консервативность, ведущую к завышению риска, так и излишний оптимизм, выражающийся в его недооценке.

Отличительной особенностью предлагаемого подхода от традиционных методик является отказ от жесткой параметризации в пользу нейросетевой аппроксимации функций дрейфа и диффузии стохастического дифференциального уравнения, что создает предпосылки для выявления скрытых нелинейных зависимостей в динамике доходностей. Кроме того, в работе исследуется гибридная модель, объединяющая параметрическую фильтрацию волатильности средствами GARCH с непараметрическим моделированием стандартизированных остатков посредством Neural SDE. Решение поставленной задачи предполагает разработку и обучение базовой модели GARCH (1,1) для оценки условной дисперсии, конструирование архитектуры Neural SDE на основе многослойного перцептрона с гарантией положительности прогнозируемой дисперсии, а также создание процедуры пост-калибровки масштаба диффузионного члена для приведения эмпирической частоты пробоев VaR к теоретически ожидаемому уровню. Завершающим шагом выступает проведение эмпирического сопоставления рассмотренных подходов по комплексу метрик точности и валидности риска с

последующей формулировкой практических рекомендаций по выбору оптимального типа модели в зависимости от объема доступных данных и стохастических характеристик конкретного актива.

Классические модели волатильности

Классическим подходом к описанию изменчивости финансовых временных рядов выступает модель обобщенной авторегрессионной условной гетероскедастичности GARCH, предложенная Т. Боллерслевым в 1986 г. В основе данного метода лежит предположение о том, что текущий уровень волатильности актива определяется двумя факторами: величиной дисперсии в предыдущий момент времени и силой недавнего рыночного шока, выраженного через квадрат доходности. Математически спецификация GARCH(1,1) записывается в виде рекуррентного соотношения

$$\sigma_t^2 = \omega + \alpha r_{t-1}^2 + \beta \sigma_{t-1}^2,$$

где σ_t^2 обозначает прогнозируемую условную дисперсию; r_{t-1} представляет собой логарифмическую доходность за предшествующий период, а коэффициенты ω, α, β оцениваются методом максимального правдоподобия. К достоинствам данной конструкции относятся прозрачность интерпретации параметров, вычислительная устойчивость алгоритмов подгонки и способность отражать кластеризацию волатильности (фундаментальное свойство рынков, при котором большие ценовые шоки следуют за большими, а малые – за малыми). Вместе с тем жесткая аналитическая форма модели накладывает определенные ограничения: она не учитывает асимметричную реакцию рынка на положительные и отрицательные новости, а также опирается на предположение о нормальности распределения остатков, что в реальных условиях часто нарушается из-за наличия экстремальных отклонений в эмпирических данных.

Альтернативным направлением развития методов прогнозирования стохастической динамики стало применение архитектур нейросетевых стохастических дифференциальных уравнений. В рамках данного подхода эволюция состояния системы описывается уравнением вида:

$$dX_t = \mu_\theta(X_t)dt + \sigma_\theta(X_t)dWt,$$

где функции дрейфа μ_θ и диффузии σ_θ не задаются вручную, а восстанавливаются нейронной сетью с обучаемыми параметрами θ. Подобная конструкция обеспечивает гибкость модели без ограничений на вид распределения, однако качество обучения напрямую зависит от объёма выборки, а

высокая ёмкость архитектуры повышает риск запоминания рыночного шума.

Численное решение стохастического дифференциального уравнения осуществлялось с использованием схемы Эйлера-Маруямы. Для дневных данных шаг дискретизации принимался равным $\Delta t = 1$, а инкремент винеровского процесса моделировался как $dWt \sim N(0,1)$, что обеспечивает корректную генерацию дискретных траекторий доходностей на каждом шаге прогнозирования.

Конечной целью построения прогнозных моделей в риск-менеджменте выступает оценка показателя Value-at-Risk. В параметрических моделях оценка Value-at-Risk на горизонте 1 день для доверительного уровня 99 % вычислялась по формуле:

$$VaR_{0.99} = -\sigma_{model} * \Phi^{-1}(0.01),$$

где $\Phi^{-1}(0.01) \approx -2.33 -$ квантиль стандартного нормального распределения. В архитектурах Neural SDE значение VaR определялось эмпирически как 1-й квантиль ансамбля из 2000 сгенерированных траекторий доходностей: $VaR_{0.99} = -Q_{1\%}(R_{sim})$. Верификация адекватности полученных оценок осуществляется с помощью статистического теста Купеца [5], который проверяет соответствие эмпирической частоты пробоев теоретически ожидаемому уровню. При корректной работе модели доля ситуаций, когда фактические потери превысили расчетный порог VaR, не должна статистически значимо отличаться от одного процента, что служит критерием состоятельности прогнозного аппарата для практического использования.

Методология исследования

Базовым инструментом сравнения выступила классическая модель GARCH(1,1), реализованная с использованием специализированной библиотеки для языка Python. Оценка параметров осуществлялась методом максимального правдоподобия, после чего проводилась диагностика остатков на предмет отсутствия автокорреляции и проверки гипотезы о нормальности распределения [6]. Данный этап служил эталоном для последующего сопоставления с более сложными алгоритмами.

Ввиду ограниченного объема выборки (~ 520 наблюдений) классическое разбиение на обучающую и валидационную выборки не применялось: обучение параметров всех моделей проводилось на полной исторической последовательности с фиксированным числом эпох (без использования early stopping), что исключает риск переобучения на этапе тренировки.

Оценка качества осуществлялась на последних $N = 150$ наблюдениях. Термин «калибровочная выборка» в данном исследовании относится исключительно к этапу пост-обработки: подбору коэффициента масштабирования диффузии на окне из 30 последних наблюдений с целью приведения эмпирической частоты пробоев к целевому уровню 1 %. Ввиду ограниченного объёма данных калибровочное окно входит в состав тестовой выборки; данный вынужденный компромисс может давать оптимистическую оценку качества калиброванной версии и учтён при интерпретации результатов.

Нейросетевой блок строился на основе архитектуры стохастических дифференциальных уравнений, где функции дрейфа и диффузии аппроксимировались многослойным перцептроном. Сеть содержала два скрытых слоя по 48 нейронов в каждом. В качестве функций активации внутренних слоев применялся модуль ELU, а для выходного слоя диффузионной компоненты использовалась функция Softplus, гарантирующая строгую положительность прогнозируемой волатильности. Обучение проводилось в среде PyTorch на протяжении 3000 эпох с применением оптимизатора AdamW (скорость обучения 5×10^{-4}) и минимизацией функции отрицательного логарифмического правдоподобия. Выбор перцептрона вместо рекуррентных архитектур обусловлен марковостью винеровского процесса: введение искусственной памяти повышает риск запоминания шума.

В рамках исследования также рассматривался гибридный подход, объединяющий параметрическую и непараметрическую составляющие. На первом этапе оценивалась условная волатильность средствами GARCH, после чего исходные доходности нормировались на полученную оценку, формируя ряд стандартизированных остатков $\varepsilon_t = r_t / \sigma_t^{GARCH}$ Далее нейросетевая модель обучалась непосредственно на этих остатках, выявляя возможные нелинейные зависимости, не уловленные классической спецификацией. Итоговый прогноз доходности формировался как произведение симулированного остатка нейросети и волатильности, предсказанной GARCH-компонентой: $r_t^{sim} = \varepsilon_t^{SDE} \times \sigma_t^{GARCH}$. Подобная конструкция позволяет разделить задачи описания общей кластеризации рисков и уточнения хвостовых характеристик распределения.

Поскольку процедура обучения нейросетевой архитектуры минимизирует функцию отрицательного логарифмического правдоподобия, она не гарантирует автоматической точности прогноза экстремальных квантилей распределения, критически важных для оценки рисков. Для устранения этого несоответствия в работу введен дополнительный этап пост-калибровки, в рамках которого подбирается коэффициент масштабирования диффузионного члена $sigma_scale$. Данный параметр определяется таким образом, чтобы эмпирическая частота пробоев прогнозируемого VaR на

уровне доверия 99 % статистически соответствовала теоретическому значению в 1 %. Поиск оптимального коэффициента осуществляется методом перебора по сетке в диапазоне от 0,5 до 2,5 с шагом 0,1 на калибровочной выборке, включающей 30 последних наблюдений, что позволяет адаптировать модель к текущим рыночным условиям без переобучения на основной исторической последовательности. Узкое окно калибровки и использование только теста Купеца (без тестов Кристоффersена) обусловлены объективно низкой статистической мощностью для оценки 1 %-квантиля на малых выборках.

Оценка качества полученных прогнозов проводилась по двум направлениям: точность предсказания волатильности и состоятельность оценки риска. Для анализа ошибок прогноза условной дисперсии использовались метрики:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}(\sigma_t - \widehat{\sigma_t})^2},$$

$$QLIKE = \frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n}\left(\frac{\sigma_t^2}{\widehat{\sigma_t^2}} - ln\frac{\sigma_t^2}{\widehat{\sigma_t^2}} - 1\right).$$

Первая представляет собой корень из среднего квадрата отклонений прогнозируемой волатильности от реализованной [3] и служит стандартной мерой близости моделей. Вторая, основанная на квази-правдоподобии, более чувствительна к ошибкам в оценке экстремальных значений и вычисляется как среднее значение выражения, включающего отношение квадратов реализованной и прогнозной волатильности и логарифм этого отношения. Для верификации адекватности оценки хвостовых рисков применялся анализ частоты пробоев, а также статистический тест Купеца. В рамках данного подхода модель признается состоятельной, если полученное значение статистики теста не приводит к отклонению нулевой гипотезы на уровне значимости 0,05, что свидетельствует о соответствии наблюдаемой частоты экстремальных событий заявленному доверительному уровню.

В ходе экспериментальной части исследования было проведено обучение и диагностика рассматриваемых моделей. Данные результаты представлены в табл. 2. При оценке параметров классической спецификации GARCH(1,1) алгоритм оптимизации продемонстрировал высокую устойчивость: сходимость коэффициентов достигалась за 15–20 итераций, а анализ остатков не выявил значимой автокорреляции, что подтверждает адекватность спецификации. Полученная условная волатильность корректно отслеживала эффект кластеризации, характерный для финансовых временных рядов. В случае нейросетевой архитектуры процесс обучения протекал в течение 3000 эпох, в ходе которых значение функции потерь снизилось с

начального уровня 0,8 до 0,4. Несмотря на общую положительную динамику, на финальных этапах обучения наблюдалась определенная нестабильность значений функции потерь, что типично для задач стохастической оптимизации на зашумленных данных. Важным выводом данного этапа стало подтверждение необходимости обязательной калибровки параметра $sigma_scale$ для получения статистически валидных оценок VaR, поскольку прямая минимизация правдоподобия не обеспечивает точной настройки хвостов распределения без дополнительных корректировок.

Таблица 2

Сравнение метрик волатильности

Модель	RMSE	QLIKE
GARCH	0.0052	0.314
Neural SDE (исходная)	0.0067	0.539
Neural SDE (калиброванная)	0.0076	1.328

Результаты тестирования оценки Value-at-Risk представлены для примера в табл. 3, рис. 1. Модель GARCH продемонстрировала наилучшую статистическую валидность: частота пробоев составила 1.3 % при значении p-value теста Купеца 0.696, что не позволяет отвергнуть гипотезу об адекватности прогноза на уровне значимости 0,05. Исходная версия Neural SDE без калибровки показала завышенную оценку риска и частоту пробоев 2 %, что указывает на консервативность модели, а не на невалидность покрытия. Применение пост-калибровки масштаба диффузии положительных результатов не дало. Гибридная модель воспроизвела результаты чистого GARCH по частоте пробоев и тесту Купеца, не обеспечив статистически значимого прироста качества, что свидетельствует об отсутствии дополнительных нелинейных паттернов в стандартизированных остатках после фильтрации условной волатильности.

Таблица 3

Результаты тестирования VaR на IMOEX

Модель	VaR (₽)	Пробоев	Частота пробоев	p-значение теста Купеца
GARCH	26,605	2	1.3 %	0.696
Neural SDE (исходная)	32,122	3	2.0 %	0.279
Neural SDE (калиброванная)	19,436	5	3.3 %	0.024
Hybrid	28,194	2	1.3 %	0.696



Рис. 1. График на тестовой выборке IMOEX

Выводы

Анализ эмпирических результатов подтверждает преимущество классической параметрической спецификации GARCH (1,1) над нейросетевой архитектурой в условиях ограниченного объема наблюдений. Устойчивость оценок GARCH обусловлена минимальным числом параметров, что исключает переобучение, тогда как высокая емкость Neural SDE требует существенно большего массива данных для выявления общих закономерностей. Поскольку доминирующим свойством финансовой волатильности является кластеризация, явно описываемый рекуррентным уравнением GARCH, стандартизированные остатки после фильтрации оказываются статистически неразличимы от белого шума, что лишает гибридную модель GARCH-Neural SDE возможностей для улучшения прогноза. Выявленная чувствительность нейросети к структурным разрывам приводит к запоминанию экстремальных значений и систематическому завышению риска, что требует обязательного этапа пост-калибровки масштаба диффузии для приведения частоты пробоев VaR к теоретическому уровню.

Отметим, что прямое копирование рекуррентной структуры GARCH в архитектуру нейросети (например, через жесткое задание лагов дисперсии) свело бы задачу к параметрической аппроксимации, что противоречит цели исследования — оценке потенциала чистой непараметрической модели. Предложенный в работе гибридный подход (GARCH-Neural SDE) частично

компенсирует этот разрыв, однако, как показали эксперименты, на малых выборках даже он не превосходит классический GARCH из-за отсутствия дополнительных нелинейных паттернов в остатках. Выбор базовой модели GARCH(1,1) вместо GARCH-EVT обусловлен малым объемом пост-кризисных данных, недостаточным для устойчивой оценки параметров экстремальных хвостов. Таким образом, для текущего режима российского рынка традиционные модели остаются оптимальным инструментом риск-менеджмента, а перспективы развития нейросетевых методов связаны с разработкой робастных функций потерь и интеграцией внешних регрессоров для повышения устойчивости прогнозов в периоды структурных сдвигов.

Список литературы

1. Bollerslev T. Generalized autoregressive conditional heteroskedasticity // Journal of Econometrics. 1986. Vol. 31. № 3. P. 307–327.

2. Kim H.Y., Won C.H. Forecasting the volatility of stock price index: A hybrid model integrating LSTM with multiple GARCH-type models // Expert Systems with Applications. 2018. Vol. 103. P. 25–37.

3. Bucci A. Realized volatility forecasting with neural networks // Journal of Financial Econometrics. 2020. Vol. 18. № 3. P. 502–531.

4. Buczynski M., Chlebus M. Garchnet: Value-at-risk forecasting with garch models based on neural networks // Computational Economics. 2024. Vol. 63. № 5. P. 1949–1979.

5. Kupiec P.H. Techniques for verifying the accuracy of risk measurement models // The Journal of Derivatives. 1995. Vol. 3. № 2. P. 73–84.

6. Архипов А.Ю. Моделирование волатильности финансовых временных рядов // Финансы и кредит. 2020. Т. 26. № 5. С. 1020–1035.

7. Liu X., Xiao T., Si S., Cao Q., Kumar S., Hsieh C.-J. Neural SDE: Stabilizing Neural ODE Networks with Stochastic Noise // arXiv preprint arXiv:1906.02355. 2019.

D.A. STENKIN, V.I. GORBACHENKO
Penza State University
stynukin@mail.ru, gorvi@mail.ru

FINDING EIGENVALUES ON PHYSICS INFORMED RADIAL BASIS FUNCTION NETWORKS

A method for finding eigenvalues using physics informed radial basis function networks (PIRBFN) is proposed, overcoming limitations of classical numerical methods. By optimizing RBF centers and widths with explicit normalization and orthogonality constraints, we guarantee an orthonormal eigenbasis. The method is demonstrated on 1D Sturm–Liouville and 2D Helmholtz problems. The Levenberg–Marquardt algorithm achieves 10^{-6} error in 7000 iterations, 17× faster than gradient descent, confirming the method is mesh-free, scalable, and suitable for inverse spectral problems.

Keywords: *eigenvalues, partial differential equations, physics-informed radial basis function networks, spectral bias, meshless methods.*

Introduction

Physics-informed neural networks (PINNs) have become a powerful tool for solving differential equations by embedding physical laws into the training process [1, 2]. Unlike classical grid-based methods such as finite differences, finite elements, or spectral methods, PINNs provide continuous, mesh-free approximations and handle both forward and inverse problems naturally. Standard PINNs typically employ multilayer perceptrons (MLPs) with sigmoidal or hyperbolic tangent activations.

When applied to eigenvalue problems, however, several challenges arise:

1. Without explicit normalization, the network converges to the trivial zero solution.
2. Sequential extraction of higher modes leads to degeneracy – the network may recover already known eigenfunctions.
3. MLP-based PINNs suffer from spectral bias – they preferentially learn low-frequency components, making accurate approximation of high-frequency eigenfunctions difficult [3].

Radial basis function (RBF) networks offer a compelling alternative. RBFs are local by nature, which allows them to approximate oscillatory functions characteristic of high-order eigenmodes with high fidelity, while also ensuring

smoothness and robustness to noise [4, 5]. Moreover, by optimizing not only the weights but also the centers and widths of the RBFs, the network becomes adaptive and can better capture solution features [6–8]. The use of RBFs in physics informed settings has proven effective in solving inverse boundary value problems [6, 7] and hydrodynamic problems [8].

In this work, we propose a physics informed RBF network (PIRBFN) for solving eigenvalue problems. We incorporate normalization and orthogonality constraints directly into the loss function, following the approach of Jin et al. [9] for quantum eigenvalue problems, and extend it to Sturm–Liouville and Helmholtz problems. The application of PINNs to Sturm–Liouville problems has been demonstrated in soil‑pile interaction studies [10]. We provide a thorough numerical comparison with a classical MLP‑based PINN, demonstrating the superiority of RBFs in terms of accuracy and convergence. Additionally, we investigate the performance of different optimization algorithms – Nesterov accelerated gradient, Adam, and Levenberg–Marquardt – for training RBF networks in spectral problems.

Our contributions are:

1. A mesh-free method for sequential extraction of eigenpairs using RBF networks with optimized centers and widths.
2. Explicit inclusion of normalization and orthogonality in the loss function, guaranteeing an orthonormal basis.
3. Demonstration on both 1D and 2D problems, including degenerate modes.
4. Investigation of optimization strategies (Nesterov, Adam, Levenberg–Marquardt) for PIRBFN.
5. Extensive comparison with MLP-PINN, highlighting the advantages of RBFs in overcoming spectral bias.

Solution Algorithm

We consider the general Sturm–Liouville eigenvalue problem for a linear second-order differential operator L on a domain $\Omega \subset R^d$:

$$Lu(x) = \lambda u(x), \quad x \in \Omega,$$

with homogeneous Dirichlet boundary conditions

$$u(x) = 0, \quad x \in \partial\Omega.$$

The eigenvalues λ and eigenfunctions $u(x)$ form a discrete spectrum; the eigenfunctions can be normalized to form an orthonormal basis in $L_2(\Omega)$. In this work, we solve two specific cases: the one-dimensional Sturm–Liouville problem (heat equation) and the two-dimensional Helmholtz equation on a rectangle. The algorithm is, however, directly applicable to higher-dimensional domains and more general operators.

Consider the one-dimensional heat equation. After separation of variables $u(x,t) = X(x)T(t)$ in the heat propagation problem $u_t = au_{xx}$ [11], we obtain the spatial Sturm–Liouville problem. For the stationary part of the solution, we have:

$$X''(x) + \mu X(x) = 0, \; x \in [0, L],$$

with homogeneous Dirichlet boundary conditions:

$$X(0) = 0, \quad X(L) = 0.$$

In this work, we set $L = \pi$. The analytical solution of this problem is well known:

$$\mu_n = n^2, X_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(nx), \; n = 1, 2, 3, ...$$

The eigenvalues μ_n determine the decay rate of the corresponding temperature modes over time. The higher the index of the eigenfunction, the more rapidly it decays. The eigenfunctions $X_n(x)$ form an orthonormal basis in the space $L_2[0, \pi]$.

Each eigenfunction $X(x)$ is approximated by a one-dimensional neural network with radial basis functions. The network has the following form:

$$X(x) = \sum_{m=1}^{n_{RBF}} w_m \varphi_m(x; \mathbf{p}_m),$$

where $\varphi(|x-c|, a) = \exp\left(-\frac{|x-c|^2}{2a^2}\right)$ – the Gauss function, n_{RBF} – the number of RBF, w_m – weight RBF φ_m, $\mathbf{p}_m$ – parameter vector RBF φ_m, where c – the center of RBF, a – the width of RBF.

The eigenvalue μ is introduced as a separate trainable parameter. Consequently, not only the RBF parameters but also the scalar quantity μ are subject to optimization. This allows the network to simultaneously learn the eigenfunction and its corresponding eigenvalue.

$$L = L_{PDE} + \lambda_{BC} L_{BC} + \lambda_N L_N + \lambda_O L_O,$$

where L_{PDE} – equation residual, L_{BC} – boundary conditions, L_N – normalization condition, L_O – orthogonality condition, $\lambda_{BC}, \lambda_N, \lambda_O$ – penalty factors.

The residual equation (PDE loss) ensures that the differential equation is satisfied:

$$L_{PDE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (X''(x_i) + \mu X(x_i))^2.$$

where derivatives can be computed either analytically or by means of automatic differentiation.

The boundary conditions ensure the satisfaction of $X(0) = X(L) = 0$:

$$L_{BC} = X(0)^2 + X(L)^2.$$

The normalization condition fixes the scale of the eigenfunction, preventing the trivial zero solution:

$$L_N = (\int_0^L X(x)^2 dx - 1)^2.$$

The orthogonality condition with respect to the previous eigenfunctions ensures linear independence and basis properties.

$$L_O = \sum_{j=1}^{k-1} (\int_0^L X(x) X_j(x) dx)^2.$$

Integrals are computed numerically using the trapezoidal rule over collocation points.

The eigenfunctions are found one after another in order of increasing eigenvalue μ.

The first eigenfunction is trained $(k = 1)$, with the condition that $L_O = 0$. After training is completed, the first eigenfunction is saved. For the second eigen-

function, a L_O is added using the fixed first eigenfunction. The process is repeated for $k = 3, 4...$ This approach guarantees the construction of an orthonormal eigenfunction basis. For optimization, the Nesterov algorithm is used. To improve accuracy, the learning rate decreases as the eigenfunction number increases.

To demonstrate the scalability of the approach, we also consider the two-dimensional eigenvalue problem on the square $\Omega = [0, \pi]^2$:

$$\Delta u(x, y) + \lambda u(x, y) = 0, \ (x, y) \in \Omega,$$

$$u = 0, \text{ on } \partial\Omega.$$

The analytical eigenpairs are

$$\lambda_{mn} = m^2 + n^2, u_{mn}(x, y) = \frac{2}{\pi} \sin(mx) \sin(ny), m, n = 1, 2, ...$$

The eigenfunction is represented by a two-dimensional RBF network:

$$u(x, y) = \sum_{m=1}^{n_{RBF}} w_m \varphi_m(x; \mathbf{p}_m),$$

with

$$\varphi_m(x, y, \mathbf{p}_m) = \exp\left(-\frac{(x - c_{m,x})^2 + (y - c_{m,y})^2}{2a_m^2} \right),$$

where $\mathbf{p}_m = (c_{m,x}, c_{m,y}, a_m)$ are the center coordinates and width of the m-th Gaussian.

The loss function for the 2D case is analogous to the 1D case, with the PDE residual:

$$L_{PDE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\Delta u(x_i, y_i) + \lambda u(x_i, y_i))^2,$$

and the normalization and orthogonality conditions defined as integrals over the 2D domain. Integrals are computed numerically using Monte Carlo integration over the collocation points. The eigenmodes are found sequentially in increasing eigenvalue order. For the first mode, orthogonality loss is omitted; after training the k-th mode, its network is frozen and used in the orthogonality loss for subsequent modes.

Three optimization approaches were investigated:

1. Nesterov accelerated gradient – fast convergence but requires manual tuning of learning rates for centers, widths, and weights.
2. Adam – adaptive, automatic tuning; provides the best accuracy (0.002 % for mode 1, 0.020 % for mode 3).
3. Levenberg–Marquardt (LM) – combines gradient descent and Gauss–Newton, providing superlinear convergence and reducing iterations by a factor of 17.

Gradients are computed via automatic differentiation and clipped by a global norm. For a fair comparison, a standard MLP-PINN was implemented with the same loss structure using a fully connected network (six hidden layers [512, 512, 512, 256, 256, 128], tanh activation, skip connections, L2 regularization, Adam with exponential LR decay). All hyperparameters were kept identical to the RBF experiments.

Experimental study

The programs are developed in Python using the open-source libraries Keras and TensorFlow. The experiments were conducted in the cloud-based Google Colab. One of the advantages of the developed software package is its implementation flexibility. Currently, there are no libraries that implement PIRBFNs. Therefore, custom RBF layers and loss functions were implemented in Python using the Keras and TensorFlow libraries. Not only the weights but also the parameters of the radial basis functions were tuned with different learning rates, so the author also implemented the Nesterov optimizer. Number of collocation points: 2000. Number of RBF centers: 120. Center range: uniform distribution over $[0, \pi]$. Initial RBF widths: $0{,}12\pi$. Number of eigenfunctions: 6. Number of epochs for each eigenfunction: [12000, 12000, 15000, 18000, 20000, 25000]. The penalty factors in the loss function were chosen empirically and were as follows: $\lambda_{BC} = 50$, $\lambda_N = 100$, $\lambda_O = 120$.

The obtained eigenvalues are presented in Table 1.

High accuracy and stable convergence are achieved for all six eigenfunctions. The error increases with mode number, reflecting the higher oscillation of higher modes. The orthogonality matrix $S_{ij} = \int_0^{\pi} X_i(x) X_j(x) dx$ for the first 6 modes is close to the identity matrix. The matrix is presented in Table 2.

Table 1

Comparison of computed and analytical eigenvalues (1D problem)

n	μ_n	μ_n (PIRBFN)	Absolute error	Relative error (%)
1	1.0000000000	0.9999729991	0.0000270009	0.0027
2	4.0000000000	4.0003786087	0.0003786087	0.009465
3	9.0000000000	8.9994049072	0.0005950928	0.006612
4	16.0000000000	16.0036125183	0.0036125183	0.022578
5	25.0000000000	24.9919605255	0.0080394745	0.032158
6	36.0000000000	35.9899482727	0.0100517273	0.027921

Table 2

Orthogonality matrix for the first six modes (1D problem)

	1	2	3	4	5	6
1	1.000000	-0.001183	-0.000833	-0.001168	0.000338	0.000150
2	-0.001183	1.000000	0.006078	-0.001173	0.000479	-0.000206
3	-0.000833	0.006078	1.000000	-0.001650	-0.001097	0.000194
4	-0.001168	-0.001173	-0.001650	1.000000	-0.001081	0.000454
5	0.000338	0.000479	-0.001097	-0.001081	1.000000	0.002687
6	0.000150	-0.000206	0.000194	0.000454	0.002687	1.000000

The off-diagonal elements do not exceed 0.007, confirming the successful operation of the orthogonality conditions. Consequently, the basis is orthonormal with high accuracy.

The convergence analysis demonstrates stable monotonic convergence for all six eigenfunctions. Rapid initial loss reduction brings the relative error to ~ 0.001 %, followed by gradual adjustment to ~ 0.0001 % and slow final convergence. Higher modes require more epochs due to their oscillatory nature and additional orthogonality constraints. Loss decay remains monotonic without divergence or local minima. The error growth proportional to the square of the mode number agrees with theory, enabling prediction of required centers and epochs. Overall, the PIRBFN approach provides high accuracy. For the 2D problem, we used 6000 collocation points, 225 RBF centers (15×15 grid), initial width 0.10π, penalty factors $\lambda_{PDE}=10, \lambda_{BC}=200, \lambda_N=150, \lambda_O=180$. Each mode was trained for 5000 epochs using the Adam optimizer.

To ensure statistical reliability, all experiments were repeated with different random initializations. Table 3 presents the experimental results.

Table 3

Comparison of RBF‑PIRBFN (Adam) and MLP‑PINN for the 2D Helmholtz problem

Mode (m, n)	Analytical	RBF‑PIRBFN error (%)	MLP‑PINN error (%)
(1.1)	2	0.0037	27.8
(1.2)	5	0.0074	> 38 (growing)
(2.1)	5	0.0032	-

The results show excellent accuracy for all three modes, with the average relative error of 0.0048 %. The method achieves relative errors below 0.008 % for all modes. The standard deviation across multiple runs was below 0,0004 for all modes, confirming the high stability and robustness of the method.

To evaluate the effectiveness of different optimization approaches, we compared three methods: Nesterov accelerated gradient, Adam, and Levenberg–Marquardt (LM). The Nesterov method achieved a relative error of 0.058 % for the first mode after 5000 epochs, but requires manual tuning of learning rates for centers, widths, and RBF weights. Adam reached an error of 0.0037 % at the same number of epochs, which is more than 15 times more accurate, and requires no manual hyperparameter tuning. When the number of epochs was increased to 12000–14000, Adam reduced the error to approximately 10^{-5}. With extended training, the errors for all modes decreased to the order of 10^{-4}, confirming the method's ability to achieve ultra‑high precision with sufficient training. The best result was obtained with the Levenberg–Marquardt algorithm: just 7000 iterations achieved a relative error of 10^{-6}, which is an order of magnitude higher accuracy than Adam with extended training and 17 times faster than standard gradient descent with momentum. This makes LM particularly attractive for problems where computational time is critical. The RBF method achieved high accuracy with only 675 trainable parameters, compared to over 1.1 million for MLP. The MLP‑PINN failed to converge for any mode – error for mode 1 was 27.8 % and grew worse for higher modes – confirming that increasing network depth does not overcome spectral bias. Hyperparameter analysis showed that 15×15 centers provided the optimal accuracy‑time trade‑off; 20×20 gave only marginal improvement. Statistical assessment over multiple independent runs with Adam gave standard deviations below 0.0004 for all modes, confirming robustness.

Fig. 1 compares the analytical and PIRBFN numerical solutions for the first mode (m = 1, n = 1).

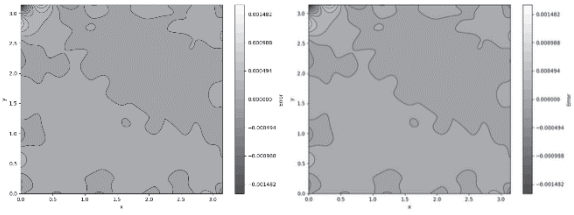


Fig. 1. Comparison of analytical and PIRBFN numerical solutions for the first mode

Fig. 2 shows the error map for the first mode.

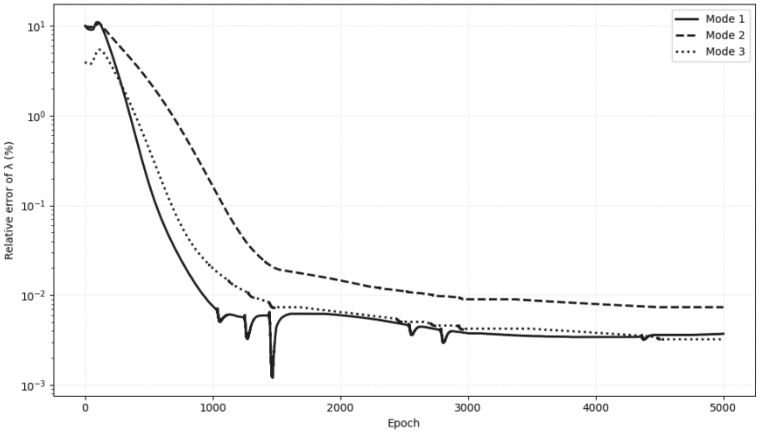


Fig. 2. Error map for the first mode

Fig. 3 presents the convergence of relative eigenvalue errors for all three modes, showing monotonic decrease and stabilization after 3000–4000 epochs.

$$\mu_n = n^2$$

Fig. 3. Convergence of relative eigenvalue errors for three modes

Conclusion

We have developed and implemented a method for sequentially finding eigenvalues and eigenfunctions of the Sturm–Liouville problem based on physics-informed neural networks with radial basis functions. Using the heat equation as an example, we have demonstrated that the method can reproduce the analytical spectrum $\mu_n = n^2$ and eigenfunctions $X_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin(nx)$ with high accuracy. The key element of the method is the explicit inclusion of normalization and orthogonality conditions in the loss function. The normalization condition L_N prevents the trivial zero solution and fixes the scale of the eigenfunctions. The orthogonality condition L_O ensures linear independence of sequentially found eigenfunctions and the construction of an orthonormal basis.

The proposed approach offers several advantages over classical numerical methods. First, it is mesh-free, simplifying adaptation to complex-shaped domains. Second, the use of RBF networks ensures high solution smoothness. Third, the method naturally extends to multidimensional problems, problems with variable coefficients, and inverse spectral problems.

To further validate the scalability of the approach, we extended the method to the 2D Helmholtz equation on a square domain. This extension demonstrated that the method successfully handles degenerate modes through the sequential training procedure with explicit orthogonality constraints. Numerical experiments confirmed high accuracy in the 2D case: relative errors of 0.0037 % for the first mode (1,1), 0.0074 % for the second (1,2), and 0.0032 % for the degenerate third (2,1). The Levenberg–Marquardt algorithm achieved 10^{-6} relative error in just 7000 iterations, 17 times faster than standard gradient descent.

The method has limitations: sensitivity to initial RBF parameters, growing computational cost with increasing modes and dimensions, and manual tuning of penalty coefficients. Future research may focus on more complex problems, automatic hyperparameter tuning, and hybrid optimization schemes.

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation Project «Physics-Informed Neural Networks for Modeling Distributed Parameter Systems» (Registration No. 126021217095-4).

Список литературы

1. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G.E. Physics‑informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations // Journal of Computational Physics. 2019. V. 378. P. 686–707.

2. Karniadakis G.E., Kevrekidis I.G., Lu L., Perdikaris P., Wang S., Yang L. Physics‑informed machine learning // Nature Reviews Physics. 2021. V. 3. P. 422–440.

3. Rahaman N., et al. On the spectral bias of neural networks // International Conference on Machine Learning. 2019. P. 5301–5310.

4. Buhmann M.D. Radial Basis Functions: Theory and Implementations. Cambridge: Cambridge University Press, 2003.

5. Fasshauer G.E. Meshfree Approximation Methods with MATLAB. Singapore: World Scientific, 2007.

6. Gorbachenko V.I., Stenkin D.A. Physics‑Informed Radial Basis Function Networks: Solving Inverse Problems for Partial Differential Equations // Lecture Notes in Networks and Systems. 2023. V. 460. P. 3–12.

7. Gorbachenko V.I., Stenkin D.A. Solving of Inverse Coefficient Problems on Networks of Radial Basis Functions // Studies in Computational Intelligence. 2022. V. 1008. P. 230–237.

8. Gorbachenko V.I., Stenkin D.A. Solving Problems of Mathematical Physics on Radial Basis Function Networks // Moscow University Physics Bulletin. 2024. V. 79. No 2. P. 706–711.

9. Jin H., Mattheakis M., Protopapas P. Physics‑informed neural networks for quantum eigenvalue problems // 2022 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN). IEEE, Padua, Italy, 2022. P. 1–8.

10. Madianos M., Lykourgas P., Loupas D., Papanikolaou M., François S., Anoyatis G., Tsikas A. A physics informed neural network (PINN) approach for soil‑pile interaction // Proceedings of the 8th International Conference on Computational Methods in Structural Dynamics and Earthquake Engineering (COMPDYN 2015). Institute of Structural Analysis and Antiseismic Research National Technical University of Athens, 2023. P. 2917–2928.

11. Cannon J.R. The One‑Dimensional Heat Equation. Cambridge: Cambridge University Press, 1984.

К.А. RUCHKIN
«CR Soft», Donetsk, Russia
construchk@gmail.com

CONTRASTIVE LOSS P-LAPLACIAN PROPAGATION METHOD FOR CLASSIFYING REGULAR REGIMES IN HAMILTONIAN SYSTEMS ON THE POINCARÉ SECTIONS

We study a graph-based semi-supervised method (GSSL), Contrastive Loss p-Laplacian Propagation (CLpLP), for classifying dynamical regimes from two-dimensional Poincaré sections when few orbit labels are available. A complete orbit, rather than an individual section point, is the classification unit. CLpLP first learns an orbit embedding with a contrastive objective and then freezes the encoder, constructs an orbit graph, and propagates labels by minimizing a variational p-Laplacian energy. We apply the method to Poincaré sections of the Euler–Poisson equations for a rigid body with a fixed point. The broader problem contains regular, multi-regular, the present experiment covers nine subclasses within the regular and multi-regular regimes. For $p \geq 2$, propagation is solved by a Newton iteration; $p = 1$ is a separate nonsmooth reference. Preliminary orbit-level results indicate accuracies of about 80–86% for CLpLP, but these values are not repeated-run statistics. The study therefore demonstrates feasibility and defines a protocol for subsequent evaluation with repeated label selections, random initializations, and mean $\pm$ standard deviation.

Keywords: *Contrastive Loss, p-Laplacian Propagation, Poincaré sections.*

Introduction

Detecting regular and chaotic regimes is central to the qualitative analysis of nonlinear dynamics. Classical tools – first integrals, stability diagrams, resonance analysis, Lyapunov indicators, and Poincaré sections–are informative but often require expert interpretation and substantial computation. The difficulty grows for multi-parameter systems, where a regime map must be constructed over many parameter values and initial conditions.

Poincaré sections make the problem amenable to pattern recognition: periodic motion produces finite point sets, quasi-periodic motion produces invariant curves, and strongly stochastic motion tends to fill two-dimensional regions. These structures are nevertheless difficult learning objects. An orbit is a variable-size geometric set rather than a fixed feature vector; its appearance changes with

scale, sampling density, integration error, and the chosen section. Moreover, visually close orbits may belong to different dynamical subclasses.

Machine learning has been used to classify Poincaré-map orbits with geometric features [7] and to distinguish regular from chaotic dynamics using time series [8]. GSSL is attractive when reliable labels are costly because it combines a small labeled set with the geometry of a larger unlabeled sample [1-3]. Its success, however, depends on whether the graph reflects class structure. Graphs formed directly from raw orbit representations can connect geometrically similar but dynamically distinct samples.

We address this limitation with a sequential method: contrastive learning first constructs a discriminative representation of complete orbits, and p-Laplacian propagation then infers labels on a graph in that representation space. The contribution is threefold: (i) an orbit-level semi-supervised formulation for Poincaré data; (ii) an adaptation of contrastive learning followed by nonlinear graph propagation; and (iii) a preliminary study on a classical rigid-body system. This work is one component of a broader program for computer-assisted detection of regular structures and potentially integrable cases [6].

Related Work

Early computational studies treated the organization of phase space as a pattern-recognition problem. Poincaré maps provide a vocabulary of fixed and periodic points, invariant curves, island chains, separatrices, and stochastic regions; this vocabulary suggests geometric descriptors that are more robust than raw point coordinates [4]. Numerical searches for periodic orbits likewise combine dynamical integration with optimization over initial conditions and system parameters [5]. These approaches show that useful automation must preserve the physical meaning of phase-space structures rather than classify arbitrary images.

Kamath [7] directly classifies Poincaré-map orbits as quasiperiodic, separatrix, island-chain, or stochastic structures. Carefully designed point-cloud features and interpretable decision trees support error analysis near ambiguous boundaries. Our objective differs in two respects: the available labels are deliberately sparse, and a learned embedding replaces a fixed feature set before graph propagation. The two approaches are complementary–hand-crafted features provide interpretability, whereas representation learning may adapt to geometric variation that is difficult to encode in advance.

A parallel line uses time series rather than explicit sections. Celletti et al. [8] train convolutional models with labels supplied by classical dynamical indicators and study transfer to related systems. Such models can accelerate large-scale cartography, but they do not directly exploit orbit geometry on a section. More

broadly, interpretable dynamical-system networks and Hamiltonian architectures introduce structural inductive biases into learned models [9, 10]. In the present work, the inductive bias enters through the orbit-level unit of analysis, label-preserving views, and smoothness on an orbit graph.

Semi-supervised graph methods assume that strongly connected samples should share labels [1, 2]. At very low label rates, graph geometry and the placement of labeled vertices become especially important; Poisson learning is one response to this problem [3]. The p-Laplacian provides another by replacing quadratic smoothness with a nonlinear energy. CLpLP combines this graph model with a contrastively learned metric so that neighborhood construction is adapted to the orbit-classification task.

Modern contrastive and self-supervised methods supply several mechanisms for learning such a metric. SimCLR uses two augmented views and many in-batch negatives [11]; MoCo maintains a momentum encoder and a queue of negatives [12]; BYOL removes explicit negatives through online and target networks [13]; SwAV predicts online cluster assignments [14]; and Barlow Twins discourages redundant embedding dimensions [15]. The present method uses a temperature-scaled contrastive objective because it accommodates both instance-level positives for every orbit and same-class positives for the small labeled subset. The comparison with these alternatives is conceptual rather than empirical in the current study.

Dynamical System and Classification Problem. Orbit-level formulation

Let a Hamiltonian system on $\Omega \subset \mathbb{R}^{2n}$ be defined by

$$\dot{q} = \frac{\partial H(q,p)}{\partial p}, \qquad \dot{p} = -\frac{\partial H(q,p)}{\partial q}. \tag{1}$$

For a smooth Poincaré section $S = \{(q,p): g(q,p) = 0\}$ with $\nabla g \neq 0$, the i th trajectory gives an orbit $\mathcal{O}_i = \{x_{i,1}, \dots, x_{i,T_i}\} \subset S$.

In the two-degree-of-freedom setting, S is two-dimensional. The points $x_{i,t}$ describe one orbit and are not independent classification samples. The dataset is $X = \{\mathcal{O}_1, \dots, \mathcal{O}_N\}$, and a labeled subset L has labels $y_i \in \{1, \dots, K\}$. The task is to predict labels for $U = \{1, \dots, N\} \backslash L$.

Each graph vertex represents one complete orbit. In the present data, approximately 100 orbits are available, each represented by about 1000 section points. Thus, roughly 10^5 raw points yield about 100 graph vertices. Evaluation is also performed per orbit, preventing long or densely sampled trajectories from receiving disproportionate weight.

The broader dynamical problem distinguishes regular, multi-regular, resonant, and chaotic motion. This initial study is restricted to nine subclasses: three regular and six multi-regular cases.

Graph-based semi-supervised perspective

The orbit collection induces a finite sampling of the solution space. A GSSL model represents that sample by a weighted graph $G = (V, E, W)$ with $V = \{1, \dots, N\}$. A similarity rule determines W, while the known labels act as boundary conditions. The learning assumption is local: orbits close in an appropriate representation should have similar class scores. Unlike a supervised classifier, propagation uses the unlabeled sample geometry directly and is therefore transductive for the available orbit collection.

The workflow has four decisions. First, an orbit representation must retain dynamical geometry while suppressing irrelevant sampling variation. Second, graph sparsity and weights must approximate local neighborhoods without joining different structures. Third, labeled vertices should cover all classes and, ideally, representative regions of each class manifold. Fourth, the smoothness energy and its numerical solver determine how boundary information is extended to the unlabeled vertices. CLpLP modifies the first and fourth decisions: a contrastive encoder learns the representation, and a p-Laplacian replaces quadratic graph smoothness.

This formulation clarifies why the number of section points is not the sample size for statistical evaluation. Points from the same integrated trajectory share initial conditions and are strongly dependent. Randomly splitting individual points would leak orbit identity between partitions and produce an optimistic estimate. All views and points derived from one trajectory must therefore remain grouped under the same orbit identifier.

Rigid body with a fixed point

The test system is the Euler–Poisson model of a rigid body with a fixed point,

$$J\dot{\omega} = (J\omega) \times \omega + \rho \times \nu, \quad \dot{\nu} = \nu \times \omega, \tag{2}$$

where $J = \mathrm{Diag}(A, B, C)$, $\omega = (p, q, r)$ is angular velocity, $\nu \in S^2$ is the unit vertical vector in the body frame, and ρ joins the fixed point to the center of mass. The parameters (J, ρ) determine a family of trajectories, while $\omega(0)$ and $\nu(0)$ specify an initial condition.

For arbitrary parameters, the system has three first integrals,

$$H = 1/2\,(J\omega)\cdot\omega - \rho\cdot\nu = h, G = J\omega\cdot\nu = g, \qquad I = \nu\cdot\nu = 1. \tag{3}$$

A fourth independent integral exists in the classical Euler–Poinsot, Lagrange, and Kovalevskaya cases and in several special cases. These known integrable regimes provide physically interpretable reference examples. For non-integrable parameter values, trajectories are computed numerically with an adaptive Runge–Kutta 4(5) method, and their intersections are reconstructed on the Poisson sphere. Analytical integrability is a reference, whereas numerical orbit geometry is the input to the learning pipeline.

For fixed (J, ρ), the integrals in Eq. (3) define a three-dimensional invariant manifold $Q^3_{h,g}$ inside the six-dimensional state representation (ω, ν). Its intersection with a suitable section produces the two-dimensional structures analyzed here. Integrability permits reduction to quadratures but does not imply that every trajectory is Lyapunov stable. Conversely, a finite numerical section cannot by itself establish non-integrability. The classifier therefore assigns empirical orbit classes; it does not replace an analytical theorem.

The section quality depends on integration time, event detection, and the accuracy with which invariants are preserved. Too few crossings can fragment an invariant curve, while accumulated integration error can thicken a regular curve and make it resemble a stochastic region. The adopted orbit-level representation reduces point-wise dependence but does not eliminate these effects. They must be controlled consistently when trainng and testing the model.

Fig. 1 shows the nine subclasses used in the experiment. Within-class variation in curvature, scale, and multiplicity motivates learning a representation instead of propagating labels directly from raw coordinates.

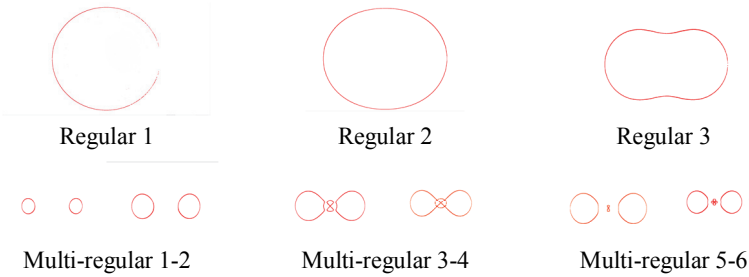


Fig. 1. Poincaré-orbit examples for the three regular and six multi-regular subclasses considered in the present experiment

Contrastive Loss p-Laplacian Propagation

CLpLP is a two-stage method, $\mathcal{O}_i$ → contrastive encoder → → frozen embedding → orbit graph → p-Laplacian propagation.

The stages are optimized sequentially, not with a joint loss. This separation allows the representation to use all orbits through instance-level augmentation while restricting class-based positives and graph boundary conditions to the initially labeled subset.

Contrastive learning has produced transferable visual representations with instance discrimination, momentum encoders, clustering, and redundancy reduction objectives [11, 12, 15]. Here, the sample is a complete Poincaré orbit. For each orbit in a batch of samples, two label-preserving augmentations are generated and encoded:

$$x_i^{(j)} = \mathrm{Aug}_j(x_i), \qquad z_i^{(j)} = \frac{\mathrm{Enc}\left(x_i^{(j)}\right)}{\| \mathrm{Enc}\left(x_i^{(j)}\right) \|}, \quad j = 1, 2. \tag{4}$$

A projection network produces normalized vectors $\hat{p}_i^{(j)}$. For an anchor view i, the positive set $P(i)$ contains the other view of the same orbit. If the orbit belongs to L, views of other labeled orbits with the same label are also positives. Unlabeled samples never receive pseudo-label-based positives. All non-anchor views form the comparison set $\mathcal{A}(i)$. The supervised/instance contrastive loss is

$$\mathcal{L}_{CL} = -\frac{1}{2N}\sum_{i=1}^{2N}\frac{1}{|P(i)|}\sum_{p\in P(i)}\log\frac{\exp\left(\hat{p}_i^{\top}\hat{p}_p/\tau\right)}{\sum_{a\in\mathcal{A}(i)}\exp\left(\hat{p}_i^{\top}\hat{p}_a/\tau\right)}, \tag{5}$$

where τ is the temperature. The convolutional encoder and projection network are trained with Eq. (5); the projection network is then discarded and the encoder is frozen. The embedding $z_i = \mathrm{Enc}(x_i)$ is used only to construct the graph for the second stage.

Augmentations must preserve the dynamical label while varying nuisance properties of the numerical representation. Their role is not to create new physical trajectories but to expose the encoder to equivalent views of the same orbit. An augmentation family should therefore be validated against the chosen section and coordinate system; a transformation that changes a relevant invariant cannot be treated as a positive view. This requirement is particularly important near thin resonances and subclass boundaries.

For labeled anchors, same-class positives encourage separation between the nine known subclasses. For unlabeled anchors, only the paired view supplies

positive supervision, so no predicted label is fed back into representation training. This design avoids confirmation bias from early graph predictions. It also makes the boundary between stages explicit: after freezing, label propagation cannot change the encoder.

Graph p-Laplacian propagation

A weighted, symmetric k-nearest-neighbor graph is built on the frozen embeddings. Let the unlabeled vertices be indexed by $i = 1, \dots, n$ and labeled vertices by $n + j$, $j = 1, \dots, m$. The nonnegative edge weight between vertices i and j is w_{ij}. For one class, u_i is the unknown score of an unlabeled vertex and g_j is the fixed boundary value of a labeled vertex. Propagation minimizes

$$J_p(u) = \frac{1}{p}\left[\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=i+1}^{n} w_{ij}\left|u_i - u_j\right|^p + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} w_{i,n+j}\left|u_i - g_j\right|^p\right]. \quad (6)$$

The problem is solved independently for each class $c = 1, \dots, K$, using one-versus-rest boundary values $g^{(c)}$. The final label is $\hat{y}_i = \operatorname{argmax}_c u_i^{(c)}$.

Graph construction is performed after the train/test protocol and labeled subset have been fixed. The neighborhood size controls a familiar bias–variance tradeoff: a very sparse graph can disconnect unlabeled components from every boundary label, while a dense graph can join distinct subclasses. Symmetrization ensures an undirected energy, and nonnegative weights preserve the convexity properties used below. Hyperparameters governing the embedding, graph, and exponent p must be selected without using held-out orbit labels.

For $p \geq 2$, define $a_{ij}(u) = w_{ij}\left|u_i - u_j\right|^{p-2}$, $\quad b_{ij}(u) = w_{i,n+j}\left|u_i - g_j\right|^{p-2}$,

$$d_i(u) = \sum_{j \neq i} a_{ij}\,(u) + \sum_{j=1}^{m} b_{ij}\,(u). \quad (7)$$

With $A = \left(a_{ij}\right)$, $B = \left(b_{ij}\right)$, $D = \operatorname{diag}(d_i)$, and $L(u) = D(u) - A(u)$, the gradient and Hessian are $\nabla J_p(u) = L(u)u - B(u)g, \quad \nabla^2 J_p(u) = (p-1)L(u)$.

Consequently, Newton's method gives the explicit fixed-point form

$$u^{k+1} = \frac{p-2}{p-1}u^k + \frac{1}{p-1}L(u^k)^{-1}B(u^k)g. \quad (8)$$

In implementation, the linear system in Eq. (8) is solved rather than explicitly inverted. With nonnegative weights, labeled boundary conditions, and suitable connectivity, the reduced system is nonsingular. When $p = 2$, the coefficients no

longer depend on u and the method reduces to ordinary graph-Laplacian propagation. Values $p > 2$ give nonlinear propagation. The case $p = 1$ is nonsmooth at zero differences and must be solved separately; it is not a Newton result.

Numerical considerations

Equation (8) should be evaluated by solving a sparse linear system at every iteration. Explicit inversion would be slower and less stable. For a connected graph with fixed labeled boundary values, the reduced $p = 2$ Laplacian is positive definite; for $p > 2$, very small score differences can produce weak coefficients. A practical implementation therefore needs a stopping tolerance, an iteration cap, and safeguards for ill-conditioned systems. Preconditioned conjugate gradients are appropriate when the reduced matrix satisfies the required definiteness conditions.

The exponent controls penalty placed on large score differences. At $p = 2$, the harmonic solution spreads labels according to ordinary quadratic smoothness. For $p > 2$, large edge discrepancies receive more weight, changing how class scores cross sparse or heterogeneous neighborhoods. This flexibility can improve alignment with a nonuniform orbit manifold, but it also makes model selection necessary. The value of p is therefore an experimental hyperparameter rather than a property inferred analytically from the mechanical system.

For $p = 1$, the energy resembles graph total variation and can favor piecewise-constant scores, but the derivative used in Eq. (8) is undefined when adjacent scores coincide. A proximal, primal–dual, or another explicitly specified nonsmooth solver is required. Keeping this case separate is essential: including a $p = 1$ table row does not validate the Newton method, which applies only in the differentiable regime considered here. Algorithm 1 summarizes the complete pipeline while avoiding duplicate descriptions of its two stages.

Algorithm 1. Sequential CLpLP

Require: orbits X, labels YL, classes K, exponent p, iterations T
1. For each contrastive-training epoch:
    2. Generate two views per orbit; encode and project them.
    3. Form instance positives and same-class positives only from the labeled set L.
    4. Update the encoder and projector using Eq. (5).
5. Freeze the encoder and compute Z = Enc(X).
6. Construct a symmetric weighted kNN graph on Z.
7. For each class c = 1,...,K, set one-versus-rest boundary values.
    8. If p = 1, solve Eq. (6) with a nonsmooth solver.
    9. Otherwise, for k = 0,...,T-1:
        10. Form A, B, D, and L using Eq. (7).
        11. Solve the linear system in update Eq. (8).
12. Return predicted labels by the maximum class score.

Experimental Protocol and Preliminary Results. Evaluation design

The primary metric is orbit-level accuracy,

$$\mathrm{Acc}_{\mathrm{orbit}} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \mathbf{1}\,(\hat{y}_i = y_i). \tag{9}$$

Each orbit contributes one prediction regardless of its number of section points. Macro-precision, macro-recall, macro-F1, and a 9 × 9 confusion matrix are secondary outputs. Point-wise accuracy is not used because section points are not independent samples.

The intended evaluation varies the number of labeled orbits per class and repeats every configuration over multiple labeled-subset selections and random initializations. Results should be reported as mean ± standard deviation. Comparisons at fixed p isolate the contribution of the contrastive representation, while comparisons among $p = 2,3,4$ at a fixed representation isolate the contribution of nonlinear propagation. The $p = 1$ result is only a nonsmooth reference.

To avoid leakage, both augmented views of an orbit must remain in the same experimental partition, and all preprocessing statistics must be estimated from the permitted training/transductive data. Labeled subsets should be class-balanced where possible, because a missing boundary class cannot be recovered by ordinary propagation. In addition to averages, reporting the distribution over label selections is important: a graph method may perform well for central labeled vertices yet fail when labels lie in low-density or peripheral regions.

Three ablations are essential. First, standard propagation on the original orbit representation tests whether the learned metric is necessary. Second, propagation without the contrastive stage at the same p isolates representation learning. Third, CLpLP with $p = 2,3,4$ tests whether nonlinear energy adds value after the embedding has been fixed. A label-budget curve and the confusion matrix should accompany aggregate metrics because nine-class imbalance or one difficult subclass can be hidden by accuracy alone.

Preliminary ablation

Table 1 reproduces the current preliminary estimates. They are anchored to an initial experiment with approximately 85 % orbit-level accuracy and are not measurements from the repeated protocol described above. Accordingly, the table indicates the expected scale and direction of the effect rather than establishing statistical superiority.

Table 1

Preliminary orbit-level estimates. Values must be replaced by repeated-run mean ± standard deviation before final benchmarking

Method	p	Accuracy (%)	Precision	Recall	Macro-F1
Label propagation (no CL)	2	74	0.75	0.72	0.72
p-Laplacian (no CL)	1	72	0.73	0.70	0.70
	2	75	0.76	0.73	0.73
	3	79	0.80	0.76	0.77
	4	81	0.82	0.78	0.79
CLpLP	1	80	0.81	0.77	0.78
	2	83	0.84	0.80	0.81
	3	85	0.86	0.82	0.84
	4	86	0.87	0.83	0.85

The estimates suggest two component-wise trends. First, at a fixed p, a learned contrastive embedding improves propagation; for example, estimated accuracy rises from 75 % without CL to 83 % with CL at $p = 2$. Second, within either representation, $p = 3$–4 outperforms $p = 2$, suggesting that nonlinear smoothing better follows the local orbit manifold. Macro-F1 shows the same pattern. Fig. 2 illustrates classified regular and multi-regular orbits.

These observations remain provisional. Finite trajectory length, orbit sampling, initialization, and ambiguous class boundaries all introduce variability. The method is therefore a statistical computational complement to analytical investigation, not a proof of integrability. A purely supervised neural classifier is not the primary baseline because it assumes a different labeling regime; neural learning here supplies the representation, while final classification uses the small labeled subset through graph propagation.

The table also exposes a reporting issue that must be resolved in the final experiment: ordinary label propagation at $p = 2$ and the «p-Laplacian without CL» row at $p = 2$ are mathematically equivalent if they use the same graph and preprocessing, yet the preliminary values differ. The final manuscript should either merge these rows or state the representation and graph difference explicitly. Likewise, the nonsmooth algorithm used for $p = 1$, graph parameters, augmentation family, number of labeled orbits, and number of repetitions must be specified before the results can be reproduced.



Fig. 2. Examples containing regular subclasses 1 (blue) and 2 (green) and multi-regular subclasses 3 (red), 4 (violet), and 5 (brown)

Conclusion

We formulated Poincaré-regime classification as orbit-level GSSL and proposed a sequential combination of contrastive representation learning and variational p-Laplacian propagation. One graph vertex and one prediction correspond to one complete orbit. Applied to the Euler–Poisson rigid-body system, the initial study covers nine regular and multi-regular subclasses. Preliminary estimates favor both the contrastive representation and nonlinear propagation, with CLpLP reaching approximately 83–86 % estimated orbit-level accuracy for $p = 2$–4.

The evidence is feasibility-level rather than definitive: the current numbers are not repeated-run statistics, the $p = 1$ solver is separate from the Newton formulation, and no claim is made that Newton optimization is superior to first-order alternatives. Future work will report repeated label-budget experiments and timing, compare additional like-for-like semi-supervised baselines, and extend the dataset to resonant and chaotic regimes.

References

1. Zhu X. Semi-Supervised Learning with Graphs. Carnegie Mellon University. 2005.

2. Chapelle O., Schölkopf B., Zien A. Semi-Supervised Learning // IEEE Trans. Neural Netw. 2009. 20. 542–542. doi:10.1109/TNN.2009.2015974.

3. Calder J., Cook B., Thorpe M., Slepčev D. Poisson learning: graph based semi-supervised learning at very low label rates. In: ICML. 2020. P. 1306–1316.

4. Neimark Yu.I., Kotelnikov I.V., Teklina I.G. Investigation of the structure of the phase space of a dynamical system as a pattern recognition problem // MMRO. P. 177–180.

5. Petalas Y., Parsopoulos K., Vrahatis M. Stochastic optimization for detecting periodic orbits of nonlinear mappings. Nonlinear Phenomena in Complex Systems 11. 285–291.

6. Ruchkin C. The general conception of the intellectual investigation of the regular and chaotic behavior of the dynamical system Hamiltonian structure //

Applied Non-Linear Dynamical Systems. 2014. Vol. 93. doi:10.1007/978-3-319-08266-0_17.

7. Kamath C. Classification of orbits in Poincaré maps using machine learning. Int. J. Data Sci. Anal. 2024. 17. 305–321. doi:10.1007/s41060-022-00368-3.

8. Celletti A., Gales C., Rodriguez-Fernandez V., Vasile M. Classification of regular and chaotic motions in Hamiltonian systems with deep learning. Sci. Rep. 2022. 12. 1890. doi:10.1038/s41598-022-05696-9.

9. Wang M., Li J. Interpretable predictions of chaotic dynamical systems using dynamical system deep learning. Sci. Rep. 2024. 14. 3143. doi:10.1038/s41598-024-53169-y.

10. Desai S.A., Mattheakis M., Sondak D., Protopapas P., Roberts S.J. Port-Hamiltonian neural networks for learning explicit time-dependent dynamical systems. Phys. Rev. 2021. E 104. 034312. doi:10.1103/PhysRevE.104.034312.

11. Chen T., Kornblith S., Norouzi M., Hinton G. A simple framework for contrastive learning of visual representations // ICML. 2020. P. 1597–1607.

12. He K., Fan H., Wu Y., Xie S., Girshick R. Momentum contrast for unsupervised visual representation learning // CVPR. 2020. P. 9729–9738. doi:10.1109/CVPR42600.2020.00975.

13. Grill J.-B., Strub F., Altché F. et al.: Bootstrap your own latent: a new approach to self-supervised learning // NeurIPS. 2020. Vol. 33. P. 21271–21284.

14. Caron M., Misra I., Mairal J., Goyal P., Bojanowski P., Joulin A. Unsupervised learning of visual features by contrasting cluster assignments // NeurIPS. 2020. Vol. 33. P. 9912–9924.

15. Zbontar J., Jing L., Misra I., LeCun Y., Deny S. Barlow Twins: self-supervised learning via redundancy reduction // ICML. 2021. P. 12310–12320.

Секция

Нейронные сети в молекулярной биологии и фармакологии

В.Д. АНТОНОВ, А.А. КОЧКАРОВ
ФИЦ БИОТЕХНОЛОГИИ РАН
antonov.vd@phystech.edu, a.kochkarov@fbras.ru

ПРИМЕНЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ГРАФОВЫХ ВЕЙВЛЕТОВ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ БЕЛОК-БЕЛКОВЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Предложена модель SGWT-GAT для предсказания белок-белковых взаимодействий, в которой спектральное графовое вейвлет-преобразование служит фиксированным экстрактором многомасштабных признаков перед энкодером на основе внимания (GAT). На бенчмарке SHS27k показано статистически значимое преимущество по ранговым метрикам ($p \le 1{,}1 \cdot 10^{-6}$) и снижение частоты «коллапса классов» – вырождения предсказаний при фиксированном пороге. Сравнение с диффузией в духе HyboWaveNet показало, что оба многомасштабных подхода превосходят базовую модель и комплементарны.

Ключевые слова: *спектральные графовые вейвлеты, графовые нейронные сети, механизм внимания, предсказание белок-белковых взаимодействий, многомасштабное представление, SGWT, GAT.*

Введение

Предсказание белок-белковых взаимодействий (protein–protein interaction, PPI) является одной из ключевых задач сетевой и системной биологии [10]: знание о том, какие белки взаимодействуют, лежит в основе реконструкции сигнальных и метаболических путей, аннотации функций белков и поиска мишеней для лекарственных препаратов. Экспериментальное определение взаимодействий трудоёмко и дорого, поэтому всё большее значение приобретают вычислительные методы, рассматривающие PPI как задачу предсказания рёбер (link prediction) на графе известных взаимодействий.

В последние годы доминирующим инструментом для задач на графах стали графовые нейронные сети (graph neural networks, GNN), прежде всего графовые свёрточные сети (GCN) [4] и графовые сети внимания (GAT) [3].

Эти модели строят представления вершин за счёт локальной агрегации признаков по соседям. Однако PPI-сети обладают рядом структурных особенностей – многомасштабной модульной организацией, наличием хабов и плотных белковых комплексов, зависимостью взаимодействий от положения белка в крупномасштабной топологии сети [11], – которые плохо улавливаются чисто локальными моделями с малым числом слоёв.

Альтернативный взгляд на признаки, заданные на вершинах графа, даёт спектральная теория графов, в которой сигнал на вершинах раскладывается по собственным векторам лапласиана – графовому аналогу преобразования Фурье. На этой основе построены спектральные свёрточные сети, использующие полиномы Чебышёва (ChebNet) [2], а также графовые вейвлет-сети (GWNN) [5], работающие в вейвлет-базисе. Спектральное графовое вейвлет-преобразование (SGWT) [1] обобщает классический вейвлет-анализ на произвольные взвешенные графы и позволяет извлекать представления сигнала на разных пространственных масштабах графовой структуры, сохраняя одновременную локализацию в вершинной и спектральной областях. Применительно к предсказанию PPI многомасштабные вейвлет-представления использует, в частности, недавняя работа HyboWaveNet [9], основанная на гиперболической геометрии; в ней, однако, многомасштабность реализуется через степени матрицы случайного блуждания (низкочастотная диффузия), а не через спектральные полосовые вейвлеты; их сравнению посвящён разд. 6.

Современные методы предсказания PPI включают последовательностные модели, например PIPR [13] (сиамская свёрточно-рекуррентная сеть над парой аминокислотных последовательностей), графовые модели, начиная с GNN-PPI [6], агрегирующие признаки белков по соседям в PPI-графе, и структурно-ориентированные модели: иерархическую HIGH-PPI [14], где каждая вершина PPI-графа сама является графом остатков, и MAPE-PPI [15], кодирующую микроокружения остатков предобученным словарём. Улучшения в них достигаются главным образом за счёт более богатого описания отдельного белка, тогда как агрегация по сети взаимодействий остаётся локальной. Настоящая работа посвящена ортогональному направлению – многомасштабной агрегации по графу взаимодействий.

В настоящей работе проверяется гипотеза о том, что многомасштабное спектральное представление признаков белков, получаемое с помощью SGWT, повышает качество предсказания PPI. Предлагается модель SGWT-GAT, в которой SGWT используется как фиксированный экстрактор многомасштабных признаков перед энкодером на основе механизма внимания. Вклад работы состоит в следующем: i) предложена и реализована схема объ-

единения SGWT-признаков с GAT для предсказания PPI; ii) проведено контролируемое сравнение с базовой моделью (PlainGAT), отличающейся только входным SGWT-блоком, на стандартном бенчмарке SHS27k по семи типам взаимодействий; iii) показано статистически значимое преимущество по ранговым метрикам и снижение частоты «коллапса классов».

1. Постановка задачи

Рассматривается задача предсказания белок-белковых взаимодействий (link prediction). Задан неориентированный взвешенный граф $G = (V, E)$, где V – множество белков, $E \subseteq V \times V$ – множество известных взаимодействий, и матрица признаков $X \in \mathbb{R}^{N \times F}$, где $N = |V|$, F – размерность признаков белка. Целью является построение функции $s: V \times V \to [0, 1]$, оценивающей вероятность взаимодействия между двумя белками.

2. Спектральные графовые вейвлет-признаки

Поскольку локальная агрегация плохо учитывает многомасштабную организацию PPI-сетей (см. введение), признаки белков рассматриваются как сигналы на вершинах графа, и с помощью SGWT [1] извлекаются их представления на нескольких масштабах.

Преобразование

Для графа G строится нормированный лапласиан

$$L = I - D^{\frac{-1}{2}} A D^{\frac{-1}{2}},$$

где A – матрица смежности, D – диагональная матрица степеней вершин. Для вейвлетного ядра g и масштаба t оператор спектрального графового вейвлет-преобразования определяется как $T_g^t = g(tL)$. Применение оператора к матрице признаков даёт многомасштабное представление $X_t = g(tL)X$.

В качестве низкочастотной (scaling) компоненты выбрано $h(\lambda) = e^{-\lambda}$, в качестве вейвлетного ядра – $g(\lambda) = \lambda e^{-\lambda}$; использованы $J = 4$ масштаба $t_j \in \{0{,}5;\ 1;\ 2;\ 4\}$. Итоговая матрица признаков после SGWT имеет вид

$$X_{SGWT} = \left[X \parallel h(L)X \parallel g(t_1 L)X \parallel \ldots \parallel g(t_J L)X\right],$$

где $\parallel$ обозначает конкатенацию вдоль признакового измерения; при $F = 50$ размерность X_{SGWT} равна $(J + 2)F = 300$.

Выбор параметров

Ядро $g(t\lambda) = t\lambda e^{-t\lambda}$ равно нулю при $\lambda = 0$ и максимально при $\lambda = 1/t$, т.е. является полосовым фильтром с центральной частотой 1/t; компоненту $\lambda \approx 0$, подавляемую всеми вейвлетами, сохраняет h(L). Масштабы логарифмически равномерны (знаменатель 2), как рекомендовано в [1]: центральные частоты 2; 1; 0,5; 0,25 покрывают спектр с шагом в одну октаву от его точной верхней границы $\lambda_{max} = 2$. Полная диагонализация L требует $O(N^3)$ операций и плохо масштабируется на крупные сети (SHS148k, STRING), поэтому $g(t_jL)$ и h(L) аппроксимируются рядами Чебышёва порядка K = 5 на $[0; \lambda_{max}]$ [1, 2], что требует лишь K умножений разреженной матрицы на X и даёт строгую K-локальность операторов. Равномерная ошибка аппроксимации при K = 5 составляет $\approx 2 \cdot 10^{-5}$ для h, не более 10^{-4} для $t \le 1$, $2{,}2 \cdot 10^{-3}$ для t = 2 и $2{,}6 \cdot 10^{-2}$ (7 % максимума ядра) для t = 4, где форма полосового фильтра ещё сохраняется; при t = 8 ошибка достигает 30 % и фильтр теряет полосовой характер, поэтому t = 4 – наибольший масштаб, допустимый при K = 5.

3. Архитектура SGWT-GAT

Предлагаемая модель SGWT-GAT (рис. 1) представляет собой последовательное соединение четырёх блоков: i) спектральный графовый вейвлет-блок, строящий многомасштабное представление X_{SGWT}; ii) слой LayerNorm для нормализации многомасштабных признаков и последующая линейная проекция в скрытое пространство размерности d = 64; iii) два слоя GATConv (4 головы внимания в первом, 1 голова во втором, $d_{hidden} = 64$, dropout = 0,3); (iv) MLP-декодер, оценивающий вероятность ребра по эмбеддингам пары белков:

$$e_{uv} = [z_u \,\|\, z_v \,\|\, |z_u - z_v| \,\|\, z_u \odot z_v], p(u,v) = \sigma(MLP(e_{uv})),$$

где $\odot$ – покомпонентное произведение, σ – сигмоида. В качестве базовой модели для сравнения используется PlainGAT – идентичная архитектура без блоков (i) и (ii): признаки X подаются непосредственно на вход GAT, т.е. модели различаются только входным блоком.

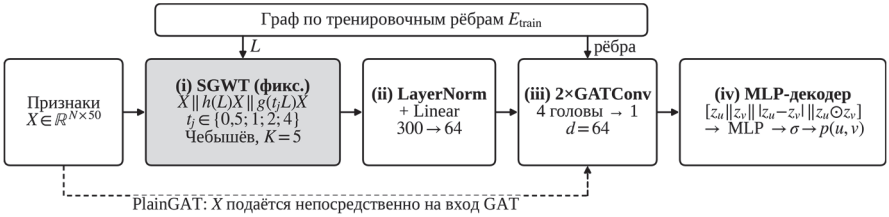


Рис. 1. Архитектура SGWT-GAT. Блок (i) не обучается:
признаки вычисляются однократно по тренировочному графу и кэшируются.
Пунктир – путь данных в базовой модели PlainGATглоА

4. Методология эксперимента

Данные и протокол сравнения

В качестве датасета использован SHS27k [13] в версии GNN-PPI [6] – стандартный бенчмарк для предсказания PPI [12], содержащий 7 типов взаимодействий (reaction, binding, ptmod, activation, inhibition, catalysis, expression); для каждого типа используется отдельный PPI-граф, признаки белков – 50-мерные эмбеддинги последовательностей, предоставленные авторами датасета. Лапласиан L строится исключительно по тренировочным рёбрам E_{train}, что исключает утечку информации из валидационного и тестового множеств через структуру графа ($E_{train} \rightarrow L_{train} \rightarrow X_{SGWT}$). Для каждого из 7 типов проведено по 10 независимых запусков с различными random seed (seed $\in \{1, \ldots, 10\}$) для каждой из двух моделей; общее число запусков – $2 \times 7 \times 10 = 140$.

Обучение и метрики

Все модели обучались оптимизатором Adam [7] с шагом 10^{-2} без L2-регуляризации, функция потерь – бинарная кросс-энтропия с логитами, ранняя остановка по валидационному ROC-AUC с терпением 100 эпох (максимум 1000). В качестве основных ранговых метрик использованы ROC-AUC и Average Precision (AP); дополнительно вычислялись точность, полнота и F1-мера при фиксированном пороге 0,35 (см. разд. 5), а также Precision@K и Recall@K при $K \in \{50, 100\}$.

Статистика и вычислительная среда

Для проверки гипотезы H_1: SGWT-GAT > PlainGAT использован односторонний знаковый ранговый тест Уилкоксона [8] для парных наблюдений (пара = одинаковый тип взаимодействия и seed), дополнительно – парный t-тест Стьюдента. Эксперименты проведены на NVIDIA GeForce RTX 5070 Ti (16 ГБ VRAM) в среде PyTorch 2.x (CUDA 12.8) с PyTorch Geometric; среднее время одного запуска 20–30 с, полный прогон 140 запусков – около 70 мин.

Исходный код и полные результаты экспериментов доступны в репозитории: https://gitverse.ru/Vladislav81/gnn_modify.

5. Результаты

Сводные показатели по типам взаимодействий

По данным табл. 1, при объединении всех 70 парных наблюдений (7 типов × 10 seed) глобальное превосходство SGWT-GAT над PlainGAT по ранговым метрикам (ROC-AUC, AP) подтверждается с высоким уровнем значимости ($p = 1{,}1 \cdot 10^{-6}$ и $5{,}5 \cdot 10^{-7}$ соответственно); по F1-мере улучшение также значимо ($p = 0{,}015$), но с большим разбросом из-за неоднородности эффекта по типам взаимодействий.

Таблица 1

**Сравнение PlainGAT и SGWT-GAT на SHS27k.
Среднее значение ± стандартное отклонение по 10 запускам.
Уровни значимости одностороннего теста Уилкоксона
(SGWT-GAT > PlainGAT): *** p < 0,001; ** p < 0,01; * p < 0,05**

Тип	ROC-AUC PlainGAT	ROC-AUC SGWT-GAT	AP PlainGAT	AP SGWT-GAT
reaction	0,917 ± 0,007	0,962 ± 0,005***	0,905 ± 0,008	0,969 ± 0,006***
binding	0,846 ± 0,016	0,871 ± 0,040*	0,865 ± 0,024	0,897 ± 0,043*
ptmod	0,958 ± 0,011	0,978 ± 0,007**	0,955 ± 0,027	0,976 ± 0,010**
activation	0,891 ± 0,008	0,890 ± 0,036	0,905 ± 0,008	0,902 ± 0,045
inhibition	0,938 ± 0,010	0,967 ± 0,006***	0,929 ± 0,008	0,969 ± 0,012***
catalysis	0,934 ± 0,006	0,926 ± 0,032	0,935 ± 0,010	0,922 ± 0,041
expression	0,855 ± 0,028	0,914 ± 0,007***	0,837 ± 0,029	0,906 ± 0,021***
Среднее	0,906	0,930	0,904	0,934

Коллапс классов

При анализе F1-меры обнаружено систематическое явление, далее называемое коллапсом классов: модель достигает высокого ROC-AUC (0,90–0,95), но при пороге 0,35 относит все тестовые пары к отрицательному классу, давая нулевую F1. PlainGAT демонстрирует коллапс ($F1 < 0{,}01$) в 54 из 70 запусков (77,1 %), SGWT-GAT – в 38 из 70 (54,3 %); по типам (PlainGAT/SGWT-GAT, из 10 запусков): reaction 10/0, binding 8/3, ptmod 7/6, activation 10/7, inhibition 6/6, catalysis 10/6, expression 3/10. Наиболее ярко эффект проявляется на reaction: PlainGAT даёт $F1 = 0$ во всех

10 запусках при ROC-AUC 0,917, тогда как SGWT-GAT не коллапсирует ни разу (средняя F1 = 0,708). Вместе с тем эффект не универсален: на inhibition частота коллапса не меняется, а на expression SGWT-GAT коллапсирует во всех 10 запусках при росте ROC-AUC до 0,914.

Природа коллапса и выбор порога

Коллапс не означает неспособности модели разделять классы: F1 = 0 при пороге τ означает, что $p(u,v) < \tau$ для всех тестовых пар, т. е. всё распределение выходных вероятностей сдвинуто ниже порога, а ROC-AUC и AP, инвариантные к монотонным преобразованиям оценок, такого сдвига не замечают. Данные подтверждают эту интерпретацию: у PlainGAT доля правильных ответов при $\tau = 0{,}35$ на сбалансированной тестовой выборке равна ровно 0,5 во всех 10 запусках на шести типах из семи, т. е. модель относит все пары к одному классу, причём не всегда к отрицательному: на ptmod, inhibition и expression в 3, 4 и 7 запусках соответственно все пары отнесены к положительному классу (F1 = 2/3, формально не коллапс). Таким образом, распределение оценок PlainGAT целиком лежит то ниже, то выше порога, и проблема состоит в калибровке, а не в выборе конкретного τ; у SGWT-GAT средняя доля правильных ответов превышает 0,5 на шести типах из семи (0,56–0,78). Порог 0,35 зафиксирован до эксперимента, одинаков для всех моделей, типов и seed и не подбирался по валидационной или тестовой выборке; критерий ранней остановки (валидационный ROC-AUC) калибровку не контролирует. Устранить коллапс можно подбором порога по валидации для каждой обученной модели или пост-калибровкой (например, температурным шкалированием); здесь это сознательно не делалось, чтобы сравнивать модели в одинаковых условиях, а основные выводы опираются на не зависящие от порога ROC-AUC и AP.

Гетерогенность, стоимость и стабильность

Эффект SGWT-признаков неоднороден по типам взаимодействий: сильный значимый прирост ROC-AUC наблюдается на reaction, inhibition, ptmod и expression ($\Delta\text{ROC} \in [+0{,}020; +0{,}059]$, $p < 0{,}01$), умеренный – на binding ($\Delta\text{ROC} = +0{,}025$, $p < 0{,}05$) и практически отсутствует на activation и catalysis ($|\Delta\text{ROC}| < 0{,}01$). Лучшая валидационная эпоха у SGWT-GAT в среднем наступает позже (213,4 против 71,6), а SGWT-признаки вычисляются однократно и кэшируются, поэтому их вклад во время обучения пренебрежимо мал. По устойчивости к случайной инициализации SGWT-GAT

превосходит PlainGAT на 4 из 7 типов взаимодействий по стандартному отклонению test ROC-AUC.

6. Спектральные и диффузионные вейвлеты: контролируемое сравнение

Работа HyboWaveNet [9] строит многомасштабное представление с помощью степеней матрицы случайного блуждания $P = D^{-1}(A + I)$: признаки агрегируются как $Z = [X \| PX \| P^2X \| \dots \| P^SX]$. Оператор P^s – низкочастотный (сглаживающий) фильтр, тогда как ядро $g(\lambda) = \lambda e^{-\lambda}$ – полосовой, сохраняющий средне- и высокочастотные компоненты сигнала. Чтобы выяснить, важна ли именно спектральная природа вейвлетов или достаточно произвольной многомасштабности, проведено контролируемое сравнение трёх режимов предобработки признаков при одинаковых энкодере (GAT), декодере и протоколе: (1) none – базовая модель без многомасштабных признаков; (2) diffusion – диффузионная агрегация P^sX в духе HyboWaveNet ($s \in \{1, 2, 3, 4\}$, $S = 4$); (3) spectral – спектральные графовые вейвлеты (предлагаемый метод; включает также низкочастотную компоненту $h(L)X$). Проведено $3 \times 7 \times 10 = 210$ запусков; эта серия выполнена независимо от описанной в разд. 5, в единой реализации всех трёх режимов, поэтому значения для режима spectral незначительно отличаются от приведённых там.

Таблица 2

Глобальные парные сравнения трёх режимов по всем 70 наблюдениям (7 типов × 10 seed). Δ – средняя разность метрики; p – односторонний знаковый ранговый тест Уилкоксона

Сравнение	ROC-AUC (Δ, p)	AP (Δ, p)	F1 (Δ, p)
diffusion vs none	+0,0204; $1{,}4\cdot10^{-7***}$	+0,0389; $2{,}3\cdot10^{-12***}$	+0,2640; $2{,}3\cdot10^{-5***}$
spectral vs none	+0,0266; $1{,}6\cdot10^{-7***}$	+0,0327; $6{,}8\cdot10^{-8***}$	+0,1253; $3{,}3\cdot10^{-2*}$
spectral vs diffusion	+0,0062; $1{,}7\cdot10^{-2*}$	−0,0062; 0,55 (н.з.)	−0,1386; н.з.

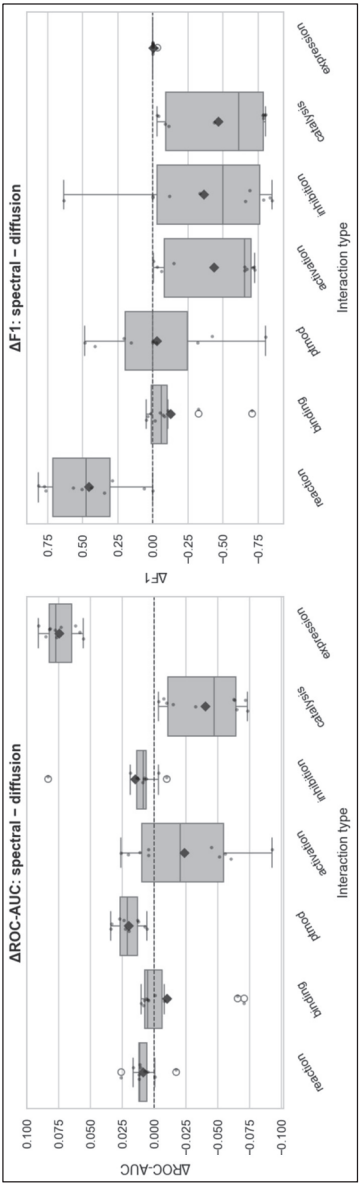


Рис. 2. Парные разности метрик (spectral – diffusion) по типам взаимодействий:
слева Δ ROC-AUC, справа Δ F1. Ромб – среднее значение,
пунктирная линия – нулевой уровень

Глобальные парные сравнения по всем 70 наблюдениям (табл. 2) показывают, что оба многомасштабных режима статистически значимо превосходят базовую модель: $p < 10^{-6}$ по ROC-AUC и AP в обоих случаях. Прямое сравнение spectral и diffusion даёт более тонкую картину: по ROC-AUC спектральные вейвлеты слабо, но значимо превосходят диффузию ($\Delta = +0{,}0062$, $p = 0{,}017$), тогда как по Average Precision различие незначимо ($\Delta = -0{,}0062$, $p = 0{,}55$), а по F1-мере диффузия в среднем превосходит спектральные вейвлеты. Ни один из двух многомасштабных операторов не доминирует над другим по всем метрикам.

По частоте коллапса классов лучший результат показывает диффузионный режим: коллапс наблюдается в 23 из 70 запусков (32,9 %), тогда как у спектральных вейвлетов – в 37 из 70 (52,9 %), а у базовой модели – в 54 из 70 (77,1 %). При этом эффект сильно зависит от типа взаимодействия: на reaction коллапс эффективнее устраняют спектральные вейвлеты (1 из 10 против 5 из 10 у диффузии), а на activation и catalysis – напротив, диффузия (0 коллапсов против 6 у спектральных вейвлетов на каждом из них).

Покомпонентный анализ (рис. 2) подтверждает, что спектральные и диффузионные вейвлеты комплементарны: преимущество спектрального подхода выражено на expression (Δ ROC-AUC = +0,075) и ptmod (+0,020), тогда как диффузия превосходит на activation и catalysis.

7. Обсуждение

Прямое сопоставление с опубликованными результатами PIPR, GNN-PPI, HIGH-PPI и MAPE-PPI [6, 13–15] некорректно из-за различий в постановке: эти работы решают на SHS27k задачу классификации типов взаимодействия на едином графе и сообщают micro-F1, тогда как здесь для каждого типа решается отдельная задача предсказания рёбер с ранговыми метриками. Кроме того, эти методы совершенствуют прежде всего описание белка (последовательность, трёхмерная структура, предобученные эмбеддинги), а SGWT-блок меняет лишь способ агрегации по сети взаимодействий и не зависит от энкодера. Поэтому содержательный следующий шаг – не конкуренция с этими моделями, а встраивание в них SGWT-блока с сохранением их протокола оценки.

Заключение

Предложена модель SGWT-GAT, использующая спектральное графовое вейвлет-преобразование как фиксированный экстрактор многомасштабных признаков перед GAT-энкодером. На SHS27k в контролируемом сравнении

с PlainGAT показано значимое преимущество по ROC-AUC и AP ($p \leq 1{,}1 \cdot 10^{-6}$) и снижение частоты коллапса классов с 77 до 54 % запусков; показано, что коллапс отражает нарушение калибровки, а не ранжирования. Сравнение с диффузионной агрегацией в духе HyboWaveNet показало, что оба многомасштабных подхода значимо превосходят базовую модель, но ни один не доминирует: источником улучшения является сама многомасштабная агрегация, а выбор оператора зависит от типа взаимодействия.

Дальнейшая работа предполагает: гибридные банки фильтров, объединяющие полосовые спектральные и низкочастотные диффузионные компоненты; обучаемые масштабы и коэффициенты Чебышёва; калибровку порога по валидационной выборке; встраивание SGWT-блока в современные PPI-модели (GNN-PPI, MAPE-PPI) и оценку на SHS148k со сплитами по белкам (BFS/DFS).

Список литературы

1. Hammond D.K., Vandergheynst P., Gribonval R. Wavelets on graphs via spectral graph theory // Applied and Computational Harmonic Analysis. 2011. Vol. 30. No. 2. P. 129–150.

2. Defferrard M., Bresson X., Vandergheynst P. Convolutional neural networks on graphs with fast localized spectral filtering // Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS). 2016. P. 3844–3852.

3. Veličković P., Cucurull G., Casanova A., Romero A., Liò P., Bengio Y. Graph attention networks // International Conference on Learning Representations (ICLR). 2018.

4. Kipf T.N., Welling M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks // International Conference on Learning Representations (ICLR). 2017.

5. Xu B., Shen H., Cao Q., Qiu Y., Cheng X. Graph wavelet neural network // International Conference on Learning Representations (ICLR). 2019.

6. Lv G., Hu Z., Bi Y., Zhang S. Learning unknown from correlations: graph neural network for inter-novel-protein interaction prediction // Proceedings of the 30th International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI). 2021. P. 3677–3683.

7. Kingma D.P., Ba J. Adam: a method for stochastic optimization // International Conference on Learning Representations (ICLR). 2015.

8. Wilcoxon F. Individual comparisons by ranking methods // Biometrics Bulletin. 1945. Vol. 1. No. 6. P. 80–83.

9. Yu Q., Yan S., Dai W., Cheng X. HyboWaveNet: Hyperbolic graph neural networks with multi-scale wavelet transform for protein-protein interaction prediction // arXiv preprint arXiv:2504.20102. 2025.

10. Milano M., Agapito G., Cannataro M. Challenges and Limitations of Biological Network Analysis // BioTech. 2022. Vol. 11. No. 3. Art. 24.

11. Barabási A.-L., Oltvai Z.N. Network biology: understanding the cell's functional organization // Nature Reviews Genetics. 2004. Vol. 5. No. 2. P. 101–113.

12. Zhou H., Wang W., Jin J., Zheng Z., Zhou B. Graph Neural Network for Protein–Protein Interaction Prediction: A Comparative Study // Molecules. 2022. Vol. 27. No. 18. Art. 6135.

13. Chen M., Ju C.J.-T., Zhou G., Chen X., Zhang T., Chang K.-W., Zaniolo C., Wang W. Multifaceted protein–protein interaction prediction based on Siamese residual RCNN // Bioinformatics. 2019. Vol. 35. No. 14. P. i305–i314.

14. Gao Z., Jiang C., Zhang J., Jiang X., Li L., Zhao P., Yang H., Huang Y., Li J. Hierarchical graph learning for protein–protein interaction // Nature Communications. 2023. Vol. 14. Art. 1093.

15. Wu L., Tian Y., Huang Y., Li S., Lin H., Chawla N.V., Li S.Z. MAPE-PPI: towards effective and efficient protein–protein interaction prediction via microenvironment-aware protein embedding // International Conference on Learning Representations (ICLR). 2024.

Секция

Нейронные сети в обработке естественного языка. Большие языковые модели

В.А. МАЛЫХ
Университет ИТМО, Санкт-Петербург
valentin.malykh@phystech.edu

СУММАРИЗАЦИЯ ДИАЛОГОВ

Суммаризация диалогов – задача автоматического создания кратких описаний многоходовых разговоров. Данная работа представляет одну из первых попыток персонализированной суммаризации диалогов с выделением характеристик пользователя. Рассматривается датасет Toloka PersonaChat Rus, ранее не применявшийся для этой задачи. Демонстрируются результаты, достижимые современными открытыми и закрытыми языковыми моделями.

Ключевые слова: *суммаризация диалогов, обработка естественного языка, нейросетевые модели, трансформеры, экстрактивная суммаризация, абстрактивная суммаризация, датасеты диалогов.*

Введение

Суммаризация диалогов – задача автоматического создания краткого, связного описания многоходовой беседы с сохранением ключевого смыслового содержания [1]. В отличие от суммаризации монологических текстов, диалогические данные обладают специфическими характеристиками: высокой интерактивностью, неформальным стилем коммуникации, многоучастниковостью, – что существенно усложняет задачу автоматической обработки [2]. Развитие предобученных языковых моделей, таких как BERT [3], GPT [4] и T5 [5], открыло новые возможности для суммаризации, а появление современных больших языковых моделей (LLM) – Qwen [32, 33], GigaChat и др. – существенно расширило их [34, 35]. Тем не менее прямое применение этих моделей к диалогическим данным часто не даёт оптимальных результатов [6]. Существующие датасеты, такие как SAMSum [7],

AMI [8] и DialogSum [9], имеют ограничения по объёму и качеству аннотаций, а традиционные метрики оценки не всегда адекватно отражают специфику диалогического резюме.

Целью настоящей работы является исследование задачи персонализированной суммаризации диалогов – автоматического выделения характеристик пользователя из многоходовой беседы. Для достижения этой цели ставятся следующие задачи: 1) провести обзор существующих методов суммаризации диалогов; 2) описать датасет Toloka Persona Chat Rus и его специфику; 3) провести экспериментальное сравнение современных языковых моделей на задаче выделения персональных характеристик из диалога. Структура работы: раздел содержит обзор литературы, далее описывается датасет и экспериментальная оценка, в заключении формулируются выводы и перспективы.

Обзор литературы. Экстрактивные методы суммаризации диалогов

Экстрактивные методы суммаризации основаны на выделении наиболее информативных фрагментов текста и их объединении в резюме без изменения формулировок [10]. Применительно к диалогам данный подход предполагает идентификацию ключевых реплик с использованием позиционных, частотных (TF-IDF) и структурных признаков [11]. Графовые модели, такие как подход Ganesan et al. [12], применяют алгоритм PageRank для ранжирования реплик по семантической близости. Несмотря на интерпретируемость, экстрактивные методы не способны генерировать обобщающие формулировки и устранять избыточность.

Абстрактивные методы суммаризации диалогов

Абстрактивные методы генерируют новые формулировки, передающие содержание в сжатой форме [13]. Современные системы базируются на архитектуре трансформера: модель Liu et al. [11] применяет иерархический кодировщик с токенами говорящих, Pegasus [14] использует целевой объект «gap sentence generation». Zhao et al. [15] предложили DialogLM с претренировкой на диалоговых корпусах, Chen et al. [16] – архитектуру с графами дискурсных отношений. Основные ограничения абстрактивных методов – галлюцинации и потеря точных деталей.

Гибридные подходы

Гибридные подходы объединяют экстрактивный и абстрактивный этапы: сначала выделяются кандидатные реплики, затем по ним генерируется итоговое резюме [17]. LeGreffe et al. [18] показали, что предварительная идентификация ключевых сегментов снижает количество галлюцинаций и улучшает сохранение деталей.

Суммаризация диалогов с помощью больших языковых моделей

Новый этап развития области связан с применением больших языковых моделей (LLM) к задаче суммаризации диалогов. В отличие от специализированных моделей предыдущего поколения, LLM обеспечивают высокое качество генерации без дообучения на целевом датасете (zero-shot и few-shot сценарии). Tian et al. [34] предложили архитектуру на основе смеси экспертов (Mixture of Experts), адаптированную к структуре диалога и позволяющую динамически маршрутизировать информацию от разных участников. Büyük [35] провёл комплексную оценку LLM на задаче абстрактивной суммаризации турецкоязычных диалогов, продемонстрировав, что языковая специфика существенно влияет на качество генерации – наблюдение, особенно релевантное для морфологически богатых языков, к которым относится русский.

Важным методологическим результатом является работа Zhang et al. [36], показавшая на материале суммаризации новостей, что ключевым фактором zero-shot способности к суммаризации является не размер модели, а её инструктивная настройка (instruction tuning). Этот вывод имеет прямое практическое следствие: компактные инструктированные модели могут быть сопоставимы по качеству с существенно более крупными, что открывает возможности для эффективного развёртывания. Систематический обзор проблем галлюцинаций LLM [37] показывает, что для диалогических данных, отличающихся неформальностью и избыточностью, риск генерации фактических ошибок (негативно влияющих на выделение персональных характеристик) остаётся существенным. Для русскоязычных диалогов актуальной остаётся задача адаптации моделей: Suin [38] демонстрирует, что двухэтапное дообучение моделей семейства Qwen существенно повышает качество суммаризации. В клинической области экспертная оценка [39] подтверждает, что LLM уже способны генерировать резюме диалогов, сопоставимые по качеству с человеческими, однако требуют тщательной настройки формата.

Датасеты для суммаризации диалогов

Основные датасеты: SAMSum [7] (16 тыс.\ диалогов из мессенджеров), DialogSum [9] (13 тыс.\ диалогов), AMI Meeting Corpus [8] (транскрипции деловых встреч), SumTitles [19] (100 тыс.\ пар «заголовок-текст» с низкой экстрактивностью), PersonaChat [20] (10 тыс.\ диалогов с персональными атрибутами участников). Большинство датасетов представлены на английском языке и уступают по объёму корпусам для суммаризации новостей, таким как CNN/DailyMail [21] и XSum [22].

Метрики оценки качества суммаризации

Основные автоматические метрики: ROUGE [23] (перекрытие n-грамм), BERTScore [24] (семантическое сходство эмбеддингов), METEOR [25] (учёт синонимов и морфологии), CHRF [26] (символьные n-граммы), а также метрики на основе LLM, такие как GPTScore [27]. Исследования показывают, что корреляция автоматических метрик с человеческими оценками для диалогов ниже, чем для монологических текстов [28].

Persona Chat Rus

Важным направлением развития области является создание качественных датасетов на языках, отличных от английского. Особый интерес представляет датасет Toloka Persona Chat Rus [29], разработанный в рамках исследований, проведённых в МФТИ. Датасет содержит профили более 1500 виртуальных персонажей и свыше 10 тысяч диалогов между участниками разговорного искусственного интеллекта.

Структура датасета включает следующие компоненты: persona_1 – описывающий персональные атрибуты первого участника, persona_2 – описывающий характеристики второго участника, и dialogue – содержащий массив реплик с маркировкой говорящего (speaker: 1 или 2) и текстом сообщения (text).

В отличие от существующих корпусов, диалоги в Toloka Persona Chat Rus не ограничиваются только заданными личностными характеристиками, что позволяет моделям демонстрировать более гибкие ответы. Однако, ограниченный объём датасета затрудняет построение больших генеративных моделей, специализированных на конкретных личностных признаках. Многие корпусы были собраны синтетическим образом, то есть сгенерированы другими нейросетями, что не гарантирует качественное обучение моделей [29].

Датасет разбит на три части для обучения и оценки моделей (табл. 1). Структура каждой записи включает уникальный идентификатор, два поля с описаниями персонажей (persona_1 и persona_2) и массив реплик с маркировкой говорящего (speaker: 1 или 2) и текстом сообщения (text). Например, persona_1 может содержать описание: “Я программист. Я люблю кофе. У меня есть брат. Я никогда не видел слонов. Я мечтаю стать дизайнером.” Каждый персонаж описывается набором из пяти характеристик, включающих профессию, семейное положение, хобби, предпочтения и другие личные черты.

Принцип разбиения датасета на обучающую, валидационную и тестовую выборки обеспечивает надежную оценку моделей путём выделения компонентных связностей для persona_2. Комбинации персонажей выбираются таким образом, чтобы каждая конкретная персона встречалась ровно в одной из трёх подвыборок. Это позволяет моделям обучаться на уникальных сочетаниях персонажей, не встречая их при валидации, а затем демонстрировать способность к обобщению на тестовых данных, где могут встречаться новые сочетания. Выбор конкретно persona_2 обусловлен тем, что использование обеих персон или persona_1 не позволяет сделать непересекающиеся подвыборки.

Таблица 1

Разбиение датасета Toloka Persona Chat Rus на обучающую, валидационную и тестовую выборки

Выборка	Количество диалогов	Количество реплик
Обучающая (dialogues_train.json)	8 010	206 991
Валидационная (dialogues_val.json)	1 001	26 482
Тестовая (dialogues_test.json)	1 002	26 135

Экспериментальная оценка
Концептуальная схема предложенного подхода

Предлагаемый подход к персонализированной суммаризации диалогов представляет собой пайплайн, состоящий из четырёх последовательных этапов (рис. 1). На вход поступает диалог из датасета Toloka Persona Chat Rus вместе с указанием целевого участника (target_speaker), для которого требуется построить описание персональных характеристик.

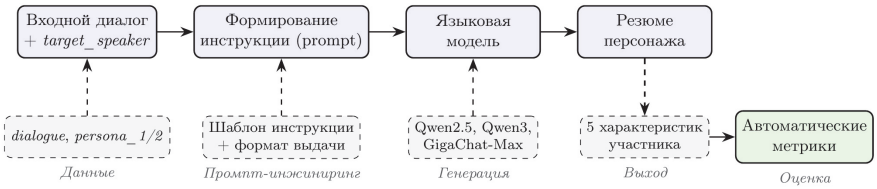


Рис. 1. Концептуальная схема подхода к персонализированной суммаризации диалогов: от входного диалога к оценке качества сгенерированного описания персонажа

На первом этапе (Данные) из датасета извлекается многоходовой диалог и идентификатор целевого участника, чьи характеристики подлежат выделению. На втором этапе (Промпт-инжиниринг) формируется инструкция, задающая модель задачу генерации пяти персональных характеристик участника в заданном формате. На третьем этапе (Генерация) инструкция подаётся на вход тестируемой языковой модели, которая формирует абстрактивное описание персонажа. На четвёртом этапе (Оценка) сгенерированное резюме сравнивается с эталонным описанием (persona) с помощью набора автоматических метрик. Такая декомпозиция позволяет независимо варьировать компоненты пайплайна – формат инструкции, используемую модель и набор метрик – и оценивать их вклад в итоговое качество.

Метрики оценки

Для оценки качества суммаризации диалогов использовались автоматические метрики, широко применяемые в задачах генерации текста и машинного перевода. Основные метрики включают BLEU (Bilingual Evaluation Understudy), измеряющую n-граммное совпадение между сгенерированным и эталонным текстом [30]. BLEU учитывает точность n-грамм и включает штраф за короткие предложения, что делает её чувствительной к длине генерируемого текста.

Метрики семейства ROUGE (Recall-Oriented Understudy for Gisting Evaluation) – ROUGE-1 и ROUGE-L – измеряют перекрытие униграмм и самой длинной общей подпоследовательности между резюме и эталоном [23]. В отличие от BLEU, ориентированного на точность, ROUGE ориентирован на полноту и лучше подходит для задач суммаризации.

Метрика CHRF (Character n-gram F-score) вычисляет F-меру на основе пересечения n-грамм символов, что делает её менее чувствительной к мор-

фологическим изменениям и более подходящей для морфологически богатых языков [26]. CHRF лучше справляется с оценкой семантически близких, но формально отличающихся формулировок.

LaBSE-Similarity использует модель Language-agnostic BERT Sentence Embedding для вычисления косинусного сходства между эмбеддингами сгенерированного и эталонного резюме [31]. Эта метрика учитывает семантическую близость текстов даже при отсутствии дословных совпадений, что делает её особенно полезной для оценки абстрактивной суммаризации.

Используемые модели

В эксперименте использовались модели семейств Qwen2.5 и Qwen3 – серии больших языковых моделей, разработанных компанией Alibaba Cloud. Qwen2.5 представляет собой семейство открытых моделей, обученных на многоязычном корпусе текстов, включающем данные на китайском, английском и многих других языках [32].

Модель Qwen2.5-0.5B-Instruct содержит 0,5 миллиарда параметров и относится к классу компактных моделей, что обеспечивает высокую скорость обработки текста при сохранении приемлемого качества генерации. Архитектура модели основана на трансформерах и использует механизм внимания для обработки контекста.

Модель Qwen2.5-1.5B-Instruct содержит 1,5 миллиарда параметров и демонстрирует более высокие показатели качества благодаря увеличённой ёмкости модели. Обе версии инструктированы (Instruct), что означает их специализацию на задачах следования инструкциям и диалоговом взаимодействии с пользователем.

Модель Qwen3-0.6B представляет следующее поколение моделей в семействе Qwen [33]. При сравнимом размере (0,6 миллиарда параметров) модель демонстрирует улучшенные характеристики благодаря усовершенствованной архитектуре, расширенному обучающему корпусу и механизму переключения между режимами «с размышлением» (thinking) и «без размышления» (non-thinking), что особенно полезно для задач, требующих структурированного вывода.

GigaChat-Max – большая языковая модель, разработанная компанией Сбер. Модель специально оптимизирована для работы с русским языком и обучена на большом корпусе русскоязычных текстов, что обеспечивает высокое качество генерации в задачах на русском языке. GigaChat-Max использует архитектуру трансформера и демонстрирует сильные показатели в задачах диалоговой генерации и суммаризации.

Модели Qwen обучены с использованием методов самоконтролируемого обучения (self-supervised learning) и затем адаптированы к задачам диалога и следования инструкций. Благодаря многоязычному обучению, модели демонстрируют способность работать с текстами на различных языках, включая русский язык.

Обоснование выбора моделей

Выбор именно компактных моделей (0,5–1,5 млрд параметров) вместо более крупных LLM (7B и выше) обусловлен несколькими соображениями. Во-первых, недавние исследования показывают, что для zero-shot суммаризации определяющим фактором является не размер модели, а её инструктивная настройка (instruction tuning): Zhang et al. [36] демонстрируют, что компактные инструктированные модели по качеству суммаризации сопоставимы с существенно более крупными. Использование версий Instruct из семейств Qwen2.5 и Qwen3 [32, 33] обеспечивает требуемую способность следования формату выдачи без необходимости дообучения.

Во-вторых, компактные модели обладают важными практическими преимуществами: низкими требованиями к вычислительным ресурсам (допускают развёртывание на consumer-уровне GPU), высокой скоростью инференса и воспроизводимостью результатов – что критично для задач персонализированной суммаризации, предполагающей развёртывание на стороне пользователя или edge-устройствах. Сопоставление трёх размеров семейства Qwen (0,5B, 0,6B, 1,5B) позволяет дополнительно исследовать влияние ёмкости модели на качество выделения персональных характеристик.

В-третьих, включение GigaChat-Max – модели, специально оптимизированной для русского языка, – позволяет оценить вклад языковой специализации. Диалоги в Toloka Persona Chat Rus содержат разговорную русскую речь с характерной морфологией и синтаксисом, и именно языковая специализация, как показывает работа Büyük [35] для турецкого языка, существенно влияет на качество генерации. Таким образом, набор моделей спроектирован так, чтобы варьировать два ключевых фактора – размер модели (Qwen 0,5B / 0,6B / 1,5B) и языковую специализацию (многоязычные Qwen против русскоязычной GigaChat-Max) – и оценить их раздельный вклад в качество персонализированной суммаризации.

Результаты экспериментов

Тестирование моделей проводилось на датасете Toloka Persona Chat Rus. Задача состояла в генерации краткого резюме диалога для одного из участников (target_speaker).

Результаты, представленные в табл. 2, показывают, что модель GigaChat-Max демонстрирует лучшие показатели по всем метрикам. Показатель BLEU составляет 0,344 для GigaChat-Max против 1,211 для Qwen3-0.6B, 0,231 для Qwen2.5-1.5B-Instruct и 0,158 для Qwen2.5-0.5B-Instruct. ROUGE-1 достигает 5,396, а CHRF – 24,709, что значительно превышает значения остальных моделей. Метрика LaBSE-Similarity для GigaChat-Max составляет 62,233, что указывает на высокую семантическую близость генерируемых резюме к эталонам.

Таблица 2

Результаты экспериментального сравнения моделей на датасете Toloka Persona Chat Rus

Модель	BLEU	ROUGE-1	ROUGE-L	CHRF	LaBSE-Similarity
Qwen2.5-0.5B-Instruct	0,158	0,050	0,050	10,661	33,083
Qwen2.5-1.5B-Instruct	0,231	1,337	1,337	19,790	54,013
Qwen3-0.6B	1,211	0,980	0,947	17,355	44,799
GigaChat-Max	0,344	5,396	5,396	24,709	62,233

Заключение

В данной работе проведён обзор современных методов суммаризации диалогов и исследована задача персонализированной суммаризации – автоматического выделения характеристик пользователя из диалога. Предложена концептуальная схема подхода (рис. 1), описывающая пайплайн от входного диалога до автоматической оценки качества. Экспериментальная оценка на датасете Toloka Persona Chat Rus показала, что наилучшие результаты демонстрирует модель GigaChat-Max, специально оптимизированная для русского языка. Компактные модели семейства Qwen показали заметно более скромные результаты, что указывает на важность языковой специализации моделей – при том, что недавние исследования [36] демонстрируют определяющую роль инструктивной настройки, а не размера модели как такового.

Результаты свидетельствуют о том, что задача выделения персональных характеристик из диалога остаётся сложной для текущих моделей. Перспективными направлениями исследований являются: создание специализированных датасетов с персональными аннотациями, разработка методов

оценки качества персонализированных резюме, а также адаптация моделей к учёту диалогической структуры и ролей участников.

Список литературы

1. Gao S. et al. Dialog2Vec: Towards Vectorial Representation of Dialogs // Proceedings of EMNLP 2019. 2019.

2. Rogozin O. et al. Meeting Summarization: A Survey // arXiv preprint arXiv:2005.09130. 2020.

3. Devlin J. et al. BERT: Pre-training of Deep Bidirectional Transformers for Language Understanding // Proceedings of NAACL-HLT 2019. 2019. P. 4171–4186.

4. Radford A. et al. Improving Language Understanding by Generative Pre-Training. OpenAI. 2018.

5. Raffel C. et al. Exploring the Limits of Transfer Learning with a Unified Text-to-Text Transformer // Journal of Machine Learning Research. 2020. Vol. 21. P. 1–67.

6. Zhong M. et al. Extractive Summarization as Text Matching // Proceedings of ACL 2020. 2020.

7. Gliwa B. et al. SAMSum Corpus: A Human-annotated Dialogue Dataset for Abstractive Summarization // Proceedings of EMNLP-IJCNLP 2019. 2019.

8. Carletta J. Unleashing the killer corpus: experiences in creating the multi-everything AMI Meeting Corpus // Language Resources and Evaluation. 2007. Vol. 41. No. 2. P. 181–190.

9. Chen J. et al. DialogSum: A Real-Life Scenario Dialogue Summarization Dataset // Proceedings of ACL-IJCNLP 2021. 2021.

10. Nallapati R. et al. SummaRuNNer: A Recurrent Neural Network based Sequence Model for Extractive Summarization // Proceedings of AAAI 2017. 2017.

11. Liu Y. et al. Dialogue Summarization with Hierarchical Encoding // Proceedings of EMNLP 2019. 2019.

12. Ganesan K. et al. Opinosis: A Graph-based Approach to Abstractive Summarization of Highly Redundant Opinions // Proceedings of COLING 2010. 2010.

13. See A. et al. Get To The Point: Summarization with Pointer-Generator Networks // Proceedings of ACL 2017. 2017.

14. Zhang J. et al. PEGASUS: Pre-training with Extracted Gap-sentences for Abstractive Summarization // Proceedings of ICML 2020. 2020.

15. Zhao W. et al. DialogLM: Pre-trained Model for Dialogue Summarization // Proceedings of ACL 2021. 2021.

16. Chen Y. et al. Dialogue Summarization with Graph-based Discourse Relations // Proceedings of NAACL 2022. 2022.

17. Gehrmann S. et al. Bottom-Up Abstractive Summarization // Proceedings of EMNLP 2018. 2018.

18. LeGreffe R. et al. Hybrid Dialogue Summarization // Proceedings of ACL 2022. 2022.

19. Malykh V., Chernis I. SumTitles: A Summarization Dataset with Low Extractiveness // Proceedings of COLING 2020. 2020. P. 5478–5487.

20. Zhang S., Dinan E., Urbanek J. et al. Personalizing Dialogue Agents: I have a dog, do you have pets too? // Proceedings of the 56th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (Volume 1: Long Papers). 2018. P. 2207–2219.

21. Hermann K.M. et al. Teaching Machines to Read and Comprehend // Proceedings of NeurIPS 2015. 2015.

22. Narayan S. et al. Don't Give Me the Details, Just the Summary! Topic-Aware Convolutional Neural Network for Abstractive Summarization // Proceedings of EACL 2018. 2018.

23. Lin C.-Y. ROUGE: A Package for Automatic Evaluation of Summaries // Proceedings of ACL 2004 Workshop. 2004.

24. Zhang T. et al. BERTScore: Evaluating Text Generation with BERT // Proceedings of ICLR 2020. 2020.

25. Banerjee S., Lavie A. METEOR: An Automatic Metric for MT Evaluation with Improved Correlation with Human Judgments // Proceedings of the ACL Workshop on Intrinsic and Extrinsic Evaluation Measures for MT and/or Summarization. 2005.

26. Popović M. CHRF: Character n-gram F-score for Automatic MT Evaluation // Proceedings of the Tenth Workshop on Statistical Machine Translation. 2015. P. 392–395.

27. Fu J., Ng S., Jiang Z., Liu P. GPTScore: Evaluate as You Desire // Proceedings of the 2024 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies (Volume 1: Long Papers). 2024. P. 6660–6675.

28. Fabbri A. et al. SummEval: Re-evaluating Summarization Evaluation // Transactions of the Association for Computational Linguistics. 2021. Vol. 9. P. 391–409.

29. Toloka Persona Chat Rus: A Russian Dialogue Dataset with Persona Information // MIPT Research Report. 2019.

30. Papineni K. et al. BLEU: A Method for Automatic Evaluation of Machine Translation // Proceedings of ACL 2002. 2002. P. 311–318.

31. Feng F. et al. LaBSE: Language-agnostic BERT Sentence Embedding // Proceedings of EMNLP 2020. 2020.

32. Qwen Team. Qwen2.5 Technical Report // arXiv preprint arXiv:2412.15115. 2024.

33. Yang A. et al. Qwen3 Technical Report // arXiv preprint arXiv:2505.09388. 2025.

34. Tian Y., Xia F., Song Y. Dialogue Summarization with Mixture of Experts based on Large Language Models // Proceedings of the 62nd Annual Meeting of the ACL. 2024.

35. Büyük O. A Comprehensive Evaluation of Large Language Models for Turkish Abstractive Dialogue Summarization // IEEE Access. 2024.

36. Zhang T., Ladhak F., Durmus E. et al. Benchmarking Large Language Models for News Summarization // Transactions of the Association for Computational Linguistics. 2024. Vol. 12. P. 1574–1591.

37. Huang L., Yu W., Ma W. et al. A Survey on Hallucination in Large Language Models: Principles, Taxonomy, Challenges, and Open Questions // ACM Transactions on Information Systems. 2025. Vol. 43. No. 2.

38. Suin A. Fine-tuning Large Language Models for Russian Dialogue Summarization: A Two-Stage Approach // Artificial Societies. 2026.

39. Fraile Navarro D., Coiera E., Hambly T. et al. Expert evaluation of large language models for clinical dialogue summarization // Scientific Reports. 2025. Vol. 15. Article 360.

Д.В. ФАЗУЛЬЯНОВ, А.И. ГУСЕВА
Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", Москва
fazulianov.dmitrii@gmail.com
aiguseva@mephi.ru

МУЛЬТИМОДАЛЬНЫЙ СЕНТИМЕНТ-АНАЛИЗ КОММУНИКАЦИЙ В ПРОДУКТОВЫХ IT-КОМАНДАХ: РОЛЬ СПИКЕР-ДИАРИЗАЦИИ И ДЕТЕКЦИИ ИРОНИИ

В работе предложена архитектура системы поддержки принятия решений для анализа эмоциональной составляющей речевых коммуникаций в командах разработки программного обеспечения, объединяющая двухуровневую модель распознавания эмоций, диаризацию говорящих и модуль детекции иронии, обученный на корпусе MUStARD. На коммуникациях участников IT-команды доменная адаптация текстовой ветви дает 0,658 и 0,447 по взвешенной и макро-F1 соответственно.

Ключевые слова: *мультимодальный сентимент-анализ, распознавание эмоций в диалоге, спикер-диаризация, детекция иронии, продуктовые IT-команды, системы поддержки принятия решений.*

Введение

Гибридный и удаленный формат работы стал нормой для продуктовых команд разработки программного обеспечения, что существенно перестроило процессы и каналы общения между сотрудниками: значительная часть обсуждений, ранее происходивших очно, перешла в видео / аудио-митинги: планирование, дейли, ретроспектива, разбор инцидентов и обсуждение архитектурных решений. Технические лидеры заинтересованы в распознавании командной динамики – ранних признаках конфликта и снижения вовлеченности [1].

Прямой перенос классических средств сентимент-анализа на такие записи ограничен по трем причинам. Текстовая расшифровка не передает интонацию и мимику, в которых заключена значительная часть эмоционального смысла речи. Оценка тональности, усредненная по встрече, скрывает локальные эпизоды и не сообщает, к кому из участников они относятся. Универсальные классификаторы теряют точность там, где ирония служит риторическим приемом и буквальный смысл расходится с подразумеваемым [2].

Отсюда требования к системе: работа по нескольким модальностям, привязка эмоций к участнику, различие иронических высказываний. Ансамблевые методы распознавания эмоций для такой системы исследованы ранее [3, 4], настоящая работа переносит акцент на обработку записи встречи в целом и добавляет три результата: измерение вклада привязки эмоций к говорящему, правило коррекции оценки по признаку иронии, обоснованное эталонной разметкой скрытых эмоций, проверку переноса в домен разработки программного обеспечения.

Описание метода

Конвейер метода обрабатывает запись командной коммуникации от медиафайла до временной шкалы эмоциональных событий, как показано на рис. 1.

Звуковая дорожка извлекается из видео средствами ffmpeg и поступает в подсистему диаризации на конвейере pyannote [5], разбивающую её на сегменты с указанием говорящего. Расшифровка выполняется однократно по полной дорожке, после чего слова распределяются между сегментами по пересечению временных интервалов. Для каждого сегмента вычисляются мультимодальные признаки, затем выполняется классификация эмоций и параллельная детекция иронии.

Распознавание эмоций реализовано по двухуровневой схеме. На уровне L1 для каждой модальности обучается логистический классификатор, формирующий вероятностный вектор по семи классам таксономии MELD [6]. Обучение идет в режиме out-of-fold по стратифицированной кросс-валидации, что исключает утечку информации на верхний уровень. Мета-классификатор уровня L2 получает вероятности L1, признак наличия текстовой реплики и индикатор корпуса. Рабочая конфигурация использует лицевую видеоветвь на основе Vision Transformer, аудиопризнаки WavLM и текстовую модель mBERT, а на уровне L2 – CatBoost [7]. Диалоговый контекст учитывается двунаправленной рекуррентной моделью по последовательности реплик; её прогноз согласуется с прогнозом позднего слияния взвешенным мягким голосование с весами по проверочной выборке. Детекция иронии вынесена в отдельный модуль на градиентом бустинге, обученный на корпусе MUStARD поверх признаков трех каналов. Корпус размечен по признаку сарказма, который далее рассматривается как наиболее представленный случай иронии. Признак иронии не изменяет вероятности основного классификатора: исходная метка сохраняется и отображается рядом со скорректированной. Правило коррекции при сработавшем признаки

иронии ограничивает выбор отрицательными классами, среди которых берется наиболее вероятный, поскольку это не максимум распределения, уверенность решения снижается (см. рис. 1).

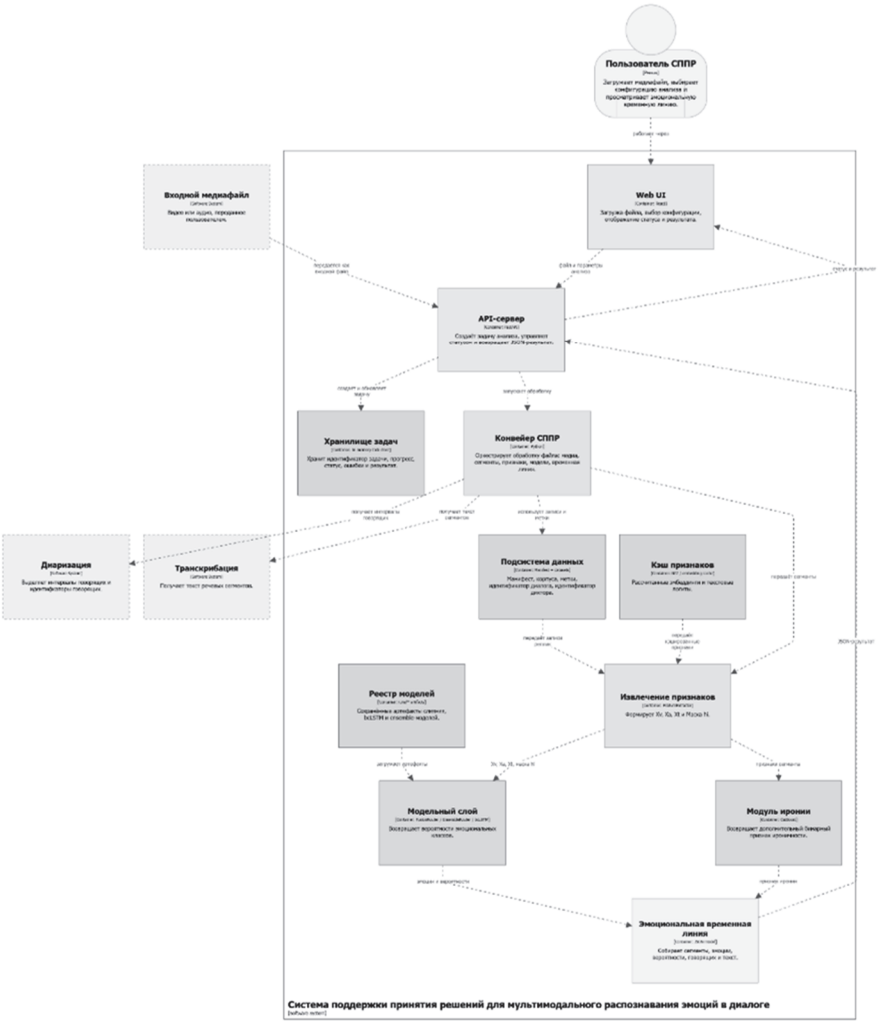


Рис. 1. Архитектура конвейера обработки записи медиафайла

Результаты собираются во временную шкалу – основной выход системы: сегменты одного говорящего с совпадающими метками объединяются, короткие выбросы подавливаются, переходы отмечаются по участникам (рис. 2).

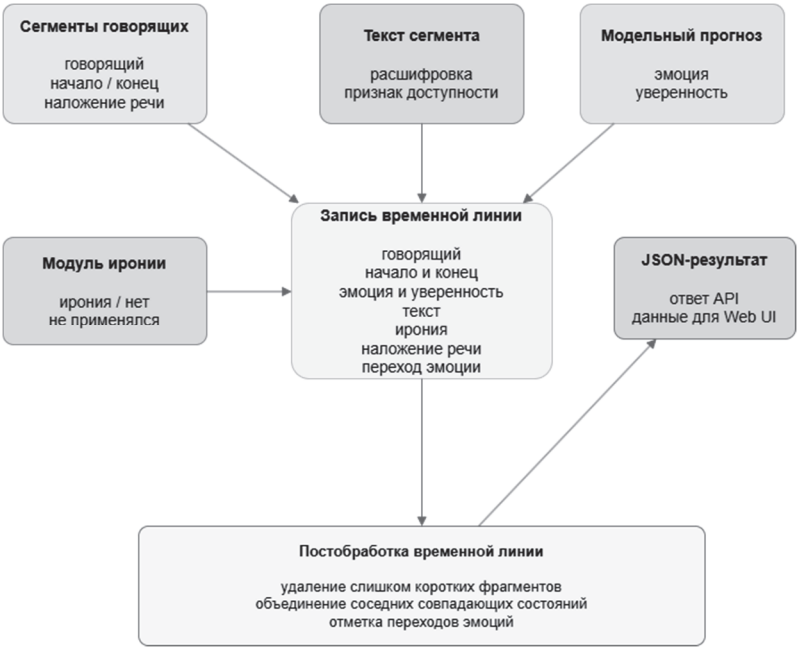


Рис. 2. Схематическое представление формирования временной линии

Программная реализация

Реализация выполнена на Python 3.10. Глубокие модели используют PyTorch; диаризация выполняется через pyannote.audio 3.1; транскрибация через faster-whisper. Извлечение аудио из видео и нарезка сегментов выполняется внешним вызовом ffmpeg. Сервисный уровень реализован на FastAPI с асинхронной задачей анализа: загрузка медиафайла и опрос состояния разделены, что позволяет интегрировать систему в существующие корпоративные конвейеры обработки записей встреч без блокировки клиентского соединения на время длительной обработки.

Экспериментальная проверка

Проверка отвечает на три вопроса: каково качество распознаваний эмоций с опубликованными результатами, сохраняется ли оно при переходе к коммуникациям разработчиков и что дает каждый из двух компонентов: модуль иронии и диаризации говорящих.

Качество распознавания эмоций

Оценка выполнена на тестовой части MELD в семиклассовой постановке. Уровни L1 и L2 обучены на обучающей части MELD, состав ансамбля подобран по проверочной части MELD, после чего их качество измерено на тестовой выборке из 2610 реплик однократно. Приводятся две метрики: взвешенная F1-мера отражает частые классы, макро-F1 усредняет по классам с равными весами и штрафует ошибки на редких эмоциях. В отличие от опубликованных результатов на корпусе MELD, в данной работе намеренно приводится макро-F1 из-за критического дисбаланса выборки: в обучающей выборке MELD объем нейтрального класса превышает объем наименее представленного в 17,6 раза. Использование взвешенной F1-меры в таких условиях маскирует реальное качество распознавания редких классов, тогда как макро-F1 наглядно показывает, насколько хорошо система справляется с каждой отдельной эмоцией. В табл. 1 представлено качество распознавания эмоций на тестовой части MELD.

Таблица 1

Качество распознавания эмоций на тестовой части MELD

Метод или конфигурация	Взвешенная F1-мера	Макро-F1
MMGCN [8]	0,587	-
MM-DFN [9]	0,595	-
MultiEMO [10]	0,667	-
Сильнейший одиночный канал: текст	0,510	0,343
Объединение трех каналов на уровне L2	0,561 ± 0,004	0,399 ± 0,003
Контекстная модель предложенного метода	0,586 ± 0,006	0,405 ± 0,008
Ансамбль двух моделей (рабочая конфигурация)	0,602	0,425

Данные табл. 1 показывают, как складывается итоговое качество; разброс указан по трем начальным состояниям генератора, а для рабочей конфигурации не приводится, поскольку её состав фиксирован и оценен однократно. Сильнейшим одиночным каналом является текстовый: 0,510 против 0,354 у аудио и 0,0226 у видео – лица в диалоговых сценах часто видны частично. Усреднение трех каналов без обучения дает 0,484 и уступает тексту, взятому отдельно, поэтому на уровне L2 применяется обученный метаклассификатор, поднимающий результат до 0,561. Контекстная модель отдельно дает на 0,025 больше, согласование двух моделей – ещё 0,016, а прирост относительно сильнейшего канала составляет 0,092, что и служит мерой пользы мультимодальной схемы. Так же в таблице представлено три внешних результата получены на том же составе модальностей, обученным на MELD. Значение 0,602 выше MMGCN на 0,015 и на 0,007 MM-DFN, однако уступает MultiEMO на 0,065.

В табл. 2 представлено качество рабочей конфигурации по классам.

Таблица 2

Качество рабочей конфигурации по классам

Класс	Число примеров	Precision	Recall	F1-мера
Нейтральное состояние	1256	0,756	0,758	0,757
Радость	402	0,545	0,619	0,580
Удивление	281	0,458	0,644	0,536
Гнев	345	0,474	0,394	0,430
Грусть	208	0,482	0,260	0,338
Страх	50	0,179	0,200	0,189
Отвращение	68	0,186	0,118	0,144

Общая точность составляет 0,609, невзвешенная точность – 0,428. По классам система надежно распознает нейтральный фон обсуждения и переходы в сторону радости, удивления и гнева. Основной канал потерь – притяжение к нейтральному классу: из 208 реплик с грустью 78 отнесены к нейтральным, из 68 с отвращением – 27, из 50 со страхом – 14. Для прикладного контура это означает, что конфликтные эпизоды выявляются надежно, тогда как подавленные состояния распознаются частично.

Апробация на корпусе диалогов разработчиков программного обеспечения

Приведенные результаты получены на диалогах телесериалов, тогда как целевым материалом служат коммуникации инженерных команд. Мультимодального корпуса совещания инженерных команд с разметкой эмоций по репликам в открытом доступе нет, на этот пробел указывают и авторы в работе [11]. Проверка выполнена на корпусе коммуникаций разработчиков: 4800 вопросов, ответом и комментариев на Stack Overflow, размеченных вручную тремя аннотаторами [12]. Материал воспроизводит главную особенность домена – высокую плотность инженерной терминологии, проверяется текстовая ветвь, вклад которой по таблице 1 наибольший.

Разметка допускает несколько эмоций на сообщение, поэтому отобраны сообщения с единственной меткой, метка LOVE исключена как не имеющая соответствия в таксономии. Получено 3476 сообщений по шести классам из семи (отвращение в разметке отсутствует) при разбиении 70 к 30. Под доменной адаптацией понимается переобучение классификатора уровня L1 на целевом корпусе при неизменном энкодере, без дообучения языковой модели. В табл. 3 представлено качество текстовой ветви на сообщениях разработчиков.

Таблица 3

Качество распознавания эмоций на тестовой части MELD

Конфигурация	Взвешенная F1-мера	Макро-F1
Перенос без адаптации	0,500	0,293
После доменной адаптации	0,658	0,447

После адаптации текстовая ветвь достигает 0,658 и 0,447. Значение адаптации видно на классе гнева: без адаптации из 249 сообщений с гневом 127 отнесены к нейтральному классу, то есть половина конфликтных сообщений остается незамеченной, а после адаптации число таких ошибок снижается до 65 и F1 по классу возрастает с 0,265 до 0,598.

Роль диаризации говорящих

Руководитель, получающий результат анализа встречи, определяет, кому из участников требуется внимание. При одной оценке на встречу

участники неразличимы, при оценке по каждому говорящему эпизоды становятся адресными. Диаризация дает вторую форму результата, поэтому её вклад измеряется числом участников, не выделяемых общей оценкой.

Измерение выполнено на тестовой части MED, где говорящие заданы разметкой корпуса, а аналогом встречи служит многосторонний диалог: это позволяет оценить эффект привязки отдельно от ошибок автоматической диаризации. Отобраны диалоги с тремя и более участниками и участники с двумя и более репликами. Преобладающей считается эмоция, встречающаяся строго чаще других, при равенстве частот участник исключается, иначе результат зависел бы от произвольного разрешения ничьей. После отбора остаются 120 диалогов и 221 участник.

Отрицательная эмоция преобладает у 38 участников, и для 20 из них преобладающая эмоция диалога отрицательной не является, при одной оценке на диалог не выделяется половина участников, требующих внимания. Профиль участника расходится с профилем диалога у 21,3% участников по эталонной разметке и у 25,7% по прогнозам. Близость величин показывает, что расхождение задано структурой диалога, а не ошибками распознавания. Диаризация не повышает точность на отдельной реплике, но без нее невозможны ретроперспектива и мониторинг вовлеченности, где предметом наблюдения служит участник.

Роль детекции иронии и коррекция оценки

Корпус MUStARD составлен из фрагментов телесериалов, поэтому первоисточник задает два протокола: в первом разбиения формируются случайно и говорящие пересекаются между обучением и тестом, а во втором обучение идет на трех сериалах, а проверка на четвертом. Выборка сбалансирована, поэтому взвешенная и макро-F1 совпадают. В табл. 4 представлены результаты детекции иронии на корпусе MUStARD.

Таблица 4

Детекция иронии на корпусе MUStARD

Метод	Пересекающиеся говорящие	Непересекающиеся говорящие
SVM на трех каналах, авторы корпуса	0,715	0,628
Предложенный модуль: CatBoost на трех каналах	0,755	0,688

Модуль превышает опорную модель первоисточника на 6 процентных пункта при непересекающихся говорящих, где разбиение задано первоисточником, и на 4 процентных пункта пересекающихся. Специализированные модели детекции сарказма достигают на втором протоколе до 0,756 [13] ценой обучения отдельной глубокой модели. Модуль решает другую задачу: он работает на уже вычисленных конвейером представлениях и при стоимости одного бустинга превосходит опорную модель того же состава.

Правило коррекции опирается на корпус MUStARD++ [14], где для тех же фрагментов размечены поверхностная и скрытая эмоции. Разметка показывает, насколько ирония меняет смысл оценки: без иронии поверхностная эмоция расходится со скрытой в 1,7% случаев, при иронии – в 98 %, а все саркастические реплики с положительной поверхностной эмоцией имеют отрицательную скрытую. Интеграция правила подняла макро-F1 распознавания скрытых эмоций с 0,216 до 0,260; при эталонной метке иронии показатель достигает 0,293, разрыв между этими значениями эквивалентен цене ошибок классификатора иронии.

Область применения и развитие

Система предназначена для выявления эпизодов повышенной негативной эмоциональности и их адресной привязки к участникам: в ретроперспективе спринта – отделить локальные всплески от фона встречи, в разборе архитектурного решения – заметить саркастическое согласие, в серии синхронизации – отследить смещения профиля участника. Обязательное условие внедрения – доменная адаптация классификатора уровня L1 на материале организацию

Страх и отвращение распознаются хуже прочих классов и требуют данных с большей их представленностью.

Заключение

Архитектура объединяет мультимодальное распознавание эмоций, диаризацию говорящих и детекцию иронии в единый контур системы поддержки принятиях решений для анализа коммуникации продуктовых IT-команд, достигая 0,602 по взвешенной F1-мере и 0,425 по макро-F1 на тестовой части MELD.

Измерен вклад привязки эмоций к говорящему: из 38 участников с преобладающей отрицательной эмоцией 20 находятся в диалогах, общая оценка которых не является отрицательной. Предложено правило коррекции по признаку иронии, обоснованное расхождением поверхностной и скрытой эмоцией в 98 % саркастических реплик и повышающее макро-F1 с 0,216 до 0,260. Показано, что перенос текстовой ветви в домен разработки требует переобучения только классификатора уровня L1: F1 по классу

гнева возрастает с 0,265 до 0,598. Дальнейшая работа связана со сбором мультимодального корпуса совещаний IT-команд с разметкой эмоций.

Список литературы

1. Edmondson A.C. The Fearless Organization: Creating Psychological Safety in the Workplace for Learning, Innovation, and Growth. Hoboken: Wiley, 2018. 256 p.

2. Castro S., Hazarika D., Perez-Rosas V., Zimmermann R., Mihalcea R., Poria S. Towards Multimodal Sarcasm Detection (An Obviously Perfect Paper) // Proceedings of the 57th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (ACL 2019). Florence: ACL. 2019. P. 4619–4629.

3. Фазульянов Д.В., Гусева А.И. Распознавание эмоциональных состояний с использованием ансамблевых методов мультимодального сентимент-анализа // Программные продукты и системы. 2026. Т. 15. № 153. С. 114–124. DOI: 10.15827/0236-235X.153.114-124.

4. Fazulianov D.V., Guseva A.I. Advanced Multimodal Sentiment Analysis Using Stacking for Enhanced Decision Support in Organizational Systems // 2024 6th International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA 2024). Lipetsk: IEEE, 2024. P. 322–327. DOI: 10.1109/SUMMA64428.2024.10803897.

5. Bredin H. pyannote.audio 2.1 speaker diarization pipeline: principle, benchmark, and recipe // Proceedings of Interspeech 2023. Dublin: ISCA, 2023. P. 1983–1987.

6. Poria S., Hazarika D., Majumder N., Naik S., Cambria E., Mihalcea R. MELD: A Multimodal Multi-Party Dataset for Emotion Recognition in Conversations // Proceedings of ACL. 2019. P. 527–536. DOI: 10.18653/v1/P19-1050.

7. Prokhorenkova L., Gusev G., Vorobev A., Dorogush A.V., Gulin A. CatBoost: unbiased boosting with categorical features // NeurIPS. 2018. Vol. 31. P. 6638–6648.

8. Hu J., Liu Y., Zhao J., Jin Q. MMGCN: Multimodal Fusion via Deep Graph Convolution Network for Emotion Recognition in Conversation // ACL-IJCNLP. 2021. P. 5666–5675. DOI: 10.18653/v1/2021.acl-long.440.

9. Hu J., Zhao W., Ma N., Wu Y., Wang H., Jin Q. MM-DFN: Multimodal Dynamic Fusion Network for Emotion Recognition in Conversations // ICASSP. 2022. P. 7037–7041. DOI: 10.1109/ICASSP43922.2022.9747760.

10. Shi W., Huang L. MultiEMO: An Attention-Based Correlation-Aware Multimodal Fusion Framework for Emotion Recognition in Conversations // Proceedings of ACL. 2023. P. 14752–14766. DOI: 10.18653/v1/2023.acl-long.824.

11. Peechatt M., Alm C.O., Bailey R. MULTICOLLAB: A Multimodal Corpus of Dialogues for Analyzing Collaboration and Frustration in Language // LREC-COLING. 2024. P. 11737–11748.

12. Novielli N., Calefato F., Lanubile F. A Gold Standard for Emotion Annotation in Stack Overflow // Proceedings of MSR. 2018. P. 14–17. DOI: 10.1145/3196398.3196453.

13. Pandey A., Vishwakarma D.K. VyAnG-Net: A novel multi-modal sarcasm recognition model by uncovering visual, acoustic and glossary features // Intelligent Data Analysis. 2025. Vol. 29. № 6. P. 1478–1500. DOI: 10.1177/1088467X251315637.

14. Ray A., Mishra S., Nunna A., Bhattacharyya P. A Multimodal Corpus for Emotion Recognition in Sarcasm // Proceedings of LREC. 2022. P. 6992–7003.

З.К. МАРТИРОСЯН[1], Б.В. МАЦАКОВ[2], М.А. КОНОВАЛОВ[2], Д.С. КАРАСАЕВ[2], В.А. МАЛЫХ[3]
[1]Университет науки и технологий МИСИС, Москва
[2]Университет ИТМО, Санкт-Петербург
[3]Международный университет информационных технологий, Алматы, Казахстан
martirosian.zav@gmail.com

ПРИМЕНЕНИЕ ВЕРИФИКАТОРОВ ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ КАЧЕСТВА ОТВЕТОВ НА ОТКРЫТЫЕ ВОПРОСЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БАЗЫ ЗНАНИЙ

Рассматривается повышение достоверности ответов RAG-систем на открытые вопросы на русском языке. В работе сравниваются четыре подхода к модификации алгоритма генерации ответов: верификатор ответа с перегенерацией, фильтр контекста, многошаговое извлечение EfficientRAG и оценка неопределённости при генерации. На бенчмарке DRAGON верификатор на основе RuModernBERT повышает ROUGE-1 с 0,412 до 0,450, фильтр – hit@k с 0,840 до 0,876, воздержание от ответа даёт +6,6 п.п. точности, верификатор обоснованности – ROC-AUC 0,998.

Ключевые слова: *верификатор, генерация ответов, извлечение знаний, оценка неопределённости, обоснованность ответа.*

Введение

Системы генерации с извлечением (Retrieval-Augmented Generation, RAG) [1] дополняют языковую модель поиском по внешнему корпусу и снижают долю галлюцинаций – правдоподобных, но фактически неверных утверждений. Однако само наличие базы знаний не гарантирует, что ответ опирается на извлечённый контекст: модель может отвечать из параметрической памяти, а извлечение – вернуть нерелевантные фрагменты. Нужны верификаторы, оценивающие согласованность ответа с контекстом, и правило отказа от ответа при низкой уверенности генерации.

Классическая схема RAG выполняет извлечение однократно, чего недостаточно для многошаговых (multi-hop) вопросов. Итеративные схемы IRCoT [2], FLARE [3] и Self-RAG [4] чередуют извлечение с рассуждением, инициируют его при низкой уверенности генерации или обучают модель решать, когда обращаться к поиску; общий недостаток – многократные вызовы LLM, увеличивающие задержку и стоимость. EfficientRAG [5] выно-

сит цикл извлечения за пределы LLM, заменяя его двумя компактными моделями на базе mDeBERTa-v3 [6] – разметчиком (Labeler) и фильтром запроса (Filter), – так что LLM вызывается однократно, для финальной генерации. Многошаговое извлечение на английском оценивают на HotpotQA [7] и MuSiQue [8].

Проверять можно и готовый ответ: дискриминативные верификаторы оценивают его соответствие источнику и применяются для отбора кандидата Best-of-N или перегенерации. Альтернатива бинарному решению «галлюцинация / не галлюцинация» – оценка неопределённости: SelfCheckGPT [9] измеряет согласованность независимых сэмплов, применяются также энтропия по логарифмам вероятностей токенов. Для русского языка такие компоненты изучены меньше, а сопоставимый бенчмарк – DRAGON [10] – появился недавно.

Вклад работы: (а) верификатор ответа и фильтр контекста на основе RuModernBERT для русского языка; (б) адаптация EfficientRAG к DRAGON и MuSiQue; (в) сравнение методов оценки неопределённости с возможностью воздержания от ответа; (г) лёгковесный верификатор обоснованности на синтезированном из DRAGON датасете. Направления (а)–(г) – независимые точки вмешательства в алгоритм генерации ответа, а не шаги одного процесса; их расположение показано на рис. 1.

Постановка задачи

Задана база знаний $D = \{d_1, \ldots, d_N\}$ – множество текстовых фрагментов (чанков), и вопрос q из набора Q. Ретривер R сопоставляет вопросу контекст, генератор G – ответ:

$$C = R(q, D) \subseteq D, |C| = k, a = G(q, C). \quad (1)$$

Каждому вопросу сопоставлены множество опорных фрагментов: $E_q \subseteq D$ и эталонный ответ $a*_q$, заданные разметкой бенчмарка. Требования к искомому решению: ответ выводим из контекста, а не из параметрической памяти; при недостаточной надёжности система воздерживается от ответа; проверка не требует вызовов LLM внутри цикла извлечения. Отличие от традиционной постановки QA в том, что цель – не только совпадение ответа с эталоном, но и обоснованность ответа контекстом при контролируемой доле отказов. Ниже определены четыре независимые функции от (q, C, a), точки приложения которых в пайплайне показаны на рис. 1.

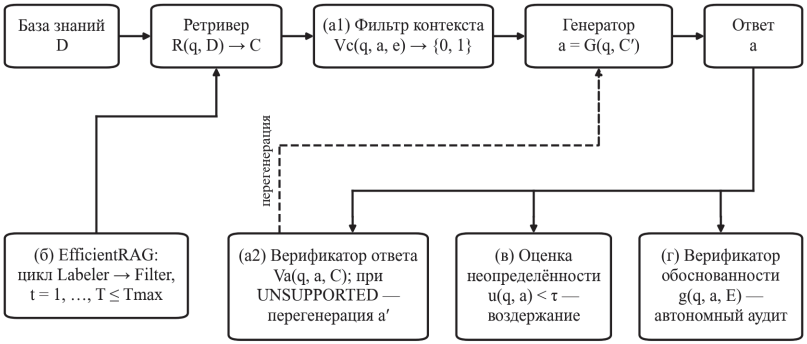


Рис. 1. Схема RAG-пайплайна и точки приложения верификаторов (а)–(г); направление (а) образуют фильтр контекста (а1) и верификатор ответа (а2)

(а) Верификатор ответа V_a оценивает согласованность ответа с контекстом (1 – SUPPORTED, 0 – UNSUPPORTED); при метке 0 ответ перегенерируется, а фильтр контекста V_c отбирает фрагменты до этапа генерации:

$$V_a(q, a, C) \in \{0, 1\}, a' = G(q, C, a), \tag{2}$$

$$C' = \{e \in C : V_c(q, a, e) = 1\}. \tag{3}$$

(б) EfficientRAG заменяет одношаговый ретривер итеративной процедурой: на шаге t разметчик присваивает фрагменту тег $\ell_t \in$ {CONTINUE, FINISH, TERMINATE}, фильтр формирует уточнённый запрос q_{t+1}, а итоговый контекст есть объединение отобранных фрагментов за $t = 1, \ldots, T \le T_{max} = 4$ шагов. (в) Оценка неопределённости сопоставляет паре (q, a) скалярную величину, а порог τ задаёт множество вопросов Q_τ, на которые система отвечает:

$$u(q, a) \in [0, 1], Q_\tau = \{q \in Q : u(q, a_q) \ge \tau\}. \tag{4}$$

(г) Верификатор обоснованности – отдельный от V_a классификатор:

$$g(q, a, E) \to [0, 1], \tag{5}$$

где E – документы-доказательства. В отличие от V_a, функция g не встроена в пайплайн и применяется как автономный аудит: ответ может быть верным по существу, но не подтверждённым документами E.

Качество извлечения при $|C| = k$ оценивается долей вопросов, для которых найден хотя бы один опорный фрагмент, и точностью отобранного контекста:

$$\text{hit@}k = (1/|Q|)\sum_{q\in Q} 1[C_q \cap E_q \neq \emptyset], \quad (6)$$

$$\text{P@}k = (1/(k|Q|))\sum_{q\in Q} |C_q \cap E_q|, \quad (7)$$

где $1[\cdot]$ – индикатор, MRR – среднее значение $1/r_q$, r_q – ранг первого опорного фрагмента. Процедура воздержания характеризуется долей сохранённых ответов и точностью на них:

$$\text{Retention}(\tau) = |Q_\tau| / |Q|, \quad (8)$$

$$\text{Coverage}(\tau) = (1/|Q_\tau|)\sum_{q\in Q_\tau} 1[a_q = a*_q]. \quad (9)$$

Данные и методика экспериментов

Основной набор данных – DRAGON (Designing RAG On Periodically Updated Corpus) [10], первый динамически обновляемый бенчмарк для RAG-систем на русском языке, оценивающий и извлечение, и генерацию. Вопросы генерируются автоматически по графу знаний, построенному на регулярно обновляемом новостном корпусе, и делятся на четыре типа: Simple (простой вопрос), Conditional (вопрос с условием), Set (перечисление 2–16 элементов) и Multi-hop (связывание фактов из разных документов); обновление корпуса снижает риск утечки данных в обучающий набор моделей. Переносимость выводов на заведомо многошаговые вопросы проверялась на англоязычном MuSiQue [8] (табл. 1); для обучения верификаторов привлекались более ранние версии DRAGON (до v1.14.0) – всего 6300 вопросов.

Таблица 1

Сводные характеристики использованных наборов данных

Параметр	DRAGON v1.15.0	MuSiQue (answerable, val.)
Язык	Русский	Английский
Размер (использовано)	600 вопросов / 542 текста	100 вопросов / 2000 абзацев
Опорных фрагментов на вопрос	1 (simple, cond) или 2–16 (set, mh)	2

Если не оговорено иное, используются ретривер distiluse-base-multilingual-cased, $k = 5$, фрагмент 1000 символов с перекрытием 100 и генератор gpt-4o-mini. Формальное сравнение строк занижает оценку там, где

ответ верен по смыслу, но отличается формулировкой, поэтому наряду с substring-match и ROUGE применялась оценка корректности LLM-судьёй (Qwen3.6-35B-A3B, температура 0), получавшим вопрос, эталон и ответ с инструкцией оценивать только совпадение по существу; критерий адаптирован по типу вопроса: сущность – для simple и conditional, множество – для set, финальный факт цепочки – для multi-hop.

Ограничение. Это прокси-метрика, а не разметка человеком: смещения судьи влияют на все метрики, опирающиеся на корректность, в том числе на AUROC и ECE в (8)–(9); проверка судьи на человеческой разметке вынесена в дальнейшую работу.

Результаты

(*а*) *Верификатор ответа и фильтр контекста.* Обучены два классификатора на основе deepvk/RuModernBERT-small [11]. Верификатор ответа V_a обучен на DRAGON (5040/1260/600 примеров train/val/test) в формате {вопрос} [SEP] {ответ} [SEP] {e_1} [SEP] {e_2} с максимальной длиной 2048 токенов (≈ 96 % примеров без усечения); при метке 0 ответ направлялся на перегенерацию с требованием опираться на приложенный контекст. Фильтр контекста V_c – вторая модель того же семейства в формате {вопрос} [SEP] {ответ} [SEP] {e}. Перегенерация улучшила метрики генерации, фильтрация контекста – метрики извлечения (табл. 2).

Таблица 2

DRAGON: метрики генерации (верификатор ответа) и извлечения (фильтр контекста) до и после внедрения

Схема	ROUGE-1	ROUGE-L	subs.-match	hit@k	MRR	P@k
Базовая	0,412	0,396	0,385	0,840	0,760	0,196
С верификатором	0,450	0,437	0,427	0,876	0,802	0,207
Δ	+0,038	+0,041	+0,042	+0,036	+0,042	+0,011

(*б*) *Многошаговое извлечение EfficientRAG.* Разметчик и фильтр обучены на mDeBERTa-v3-base [6] (≈ 86 млн параметров) на двуязычных (EN/RU) данных из HotpotQA и DRAGON с метками, синтезированными LLM: 50 тыс. примеров для разметчика и 10 тыс. для фильтра; на отложенной выборке разметчик достиг точности тегирования ≈0,94, фильтр – token-точности ≈0,87. Схемы различаются только наличием итеративного цикла

(до 4 шагов). На DRAGON цикл резко повышает P@k (0,102 → 0,356) и MRR (0,336 → 0,431), но hit@k слегка снижается (0,495 → 0,487), а метрики генерации падают: 140 верных ответов из 600 против 147. Среднее число шагов 1,09 – вопросы DRAGON преимущественно одношаговые. На MuSiQue среднее число шагов 2,10 и 58% вопросов требуют не менее двух шагов; P@k почти удваивается (0,144 → 0,286) при сокращении контекста с 5 до 3,45 фрагмента, hit@k падает на 0,050, а метрики генерации слегка растут (табл. 3).

Таблица 3

DRAGON (DRG) и MuSiQue (MSQ): базовая схема (Base) и EfficientRAG (EffRAG)

Метрика	DRG Base	DRG EffRAG	DRG Δ	MSQ Base	MSQ EffRAG	MSQ Δ
hit@k	0,495	0,487	−0,008	0,670	0,620	−0,050
MRR	0,336	0,431	+0,095	0,566	0,573	+0,007
P@k	0,102	0,356	+0,254	0,144	0,286	+0,142
ROUGE-1	0,187	0,184	−0,003	0,139	0,140	+0,001
ROUGE-L	0,180	0,176	−0,004	0,139	0,140	+0,001
subs.-match	0,245	0,233	−0,012	0,240	0,250	+0,010

Итак, цикл активируется пропорционально сложности вопроса и формирует более чистый контекст, однако рост точности извлечения не переходит в рост качества ответа. Причин две. Во-первых, часть прироста – эффект знаменателя в (7): на MuSiQue сокращение контекста с 5 до 3,45 фрагмента само по себе даёт множитель 1,45 из наблюдаемых 1,99, тогда как вклад ранжирования показывает MRR (+0,095 на DRAGON). Во-вторых, ответ возможен лишь при наличии опорного фрагмента, то есть определяется hit@k, а не P@k, тогда как hit@k снизился на обоих бенчмарках; при $k = 5$ промпт занимает менее 2 % окна генератора, поэтому удаление отвлекающих фрагментов почти не даёт выигрыша.

(*в*) *Оценка неопределённости и воздержание от ответа.* Конфигурация: 6300 вопросов DRAGON, ретривер FAISS + BGE-M3, генератор Qwen3-14B. Сравнивались SelfCheckGPT [9] (согласованность 4 сэмплов по n-граммам), Linguistic Verbal Uncertainty (LVU – явная оценка уверенности моделью в процентах) и Token-Level Entropy (энтропия по логарифмам вероятностей токенов). Базовая точность системы – 81,7 % (5144 верных ответа из 6300). Лидером оказался LVU: ECE 0,148 при AUROC 0,708 против 0,171 и 0,524 у SelfCheck и 0,157 и 0,435 у Token Entropy. AUROC 0,524

едва выше случайного, что ожидаемо для коротких фактических ответов; результат Token Entropy хуже случайного, вероятно, из-за артефактов логарифмов вероятностей при тензорно-параллельном инференсе.

При пороге $\tau = 0$ по шкале LVU достигается Retention = 0,890 при Coverage = 0,883: воздерживаясь от ответа на 11% наиболее неопределённых вопросов, система повышает точность ответов на 6,6 п.п. относительно базовых 81,7 %.

(*г*) *Верификатор фактологической обоснованности.* Поскольку DRAGON не содержит готовых меток обоснованности, на его основе синтезирован сбалансированный датасет из 18 000 примеров: обоснованные ответы порождались компактной моделью при наличии «золотого» контекста, необоснованные – тем же генератором в режиме closed-book; разбиение train/val/test – 70/15/15 по идентификатору вопроса. Обучены ruDeBERTa-base [11] (124 млн параметров, окно 512) и RuModernBERT-small [12] (35 млн, окно 2048); порог выбран по критерию Юдена, baseline – перенос англоязычного DeReC [13] (DeBERTa-v3, обученный на RAWFC) без дообучения.

Ограничение методологии. Два класса порождаются в разных режимах (с контекстом и без него), поэтому могут различаться не только по обоснованности, но и по стилю – длине и уверенности формулировок, – и классификатор способен частично выучить эти артефакты. Частичной защитой служат общий генератор и единый шаблон промпта в обоих режимах, но риск этим не устраняется: строгая проверка требует контрольного эксперимента с выравниванием длины и стиля между классами – например, с негативами, порождёнными тем же генератором при наличии контекста, но уводящими от подтверждаемых фактов. Он вынесен в дальнейшую работу, поэтому значения ROC-AUC и F1 ниже характеризуют способность отличать данную конструкцию классов, а не опору модели на семантическую обоснованность.

Прямой перенос англоязычного верификатора оказался неработоспособен: ROC-AUC 0,545, практически на уровне случайного угадывания. Обе модели, дообученные на DRAGON, разделяют классы уверенно (табл. 4, рис. 2), причём лучший результат у более компактной RuModernBERT-small – ROC-AUC 0,998 и F1 0,986 против 0,993 и 0,970 у втрое более крупной ruDeBERTa-base: решающими оказываются длина окна и структурированное представление доказательств, а не размер модели.

Таблица 4

Сравнение верификаторов обоснованности

Верификатор	Параметров	ROC-AUC	F1
DeBERTa-v3, перенос с RAWFC	≈ 184 млн	0,545	≈ 0,50
ruDeBERTa-base, DRAGON	≈ 124 млн	0,993	0,970
RuModernBERT-small, DRAGON	≈ 35 млн	0,998	0,986

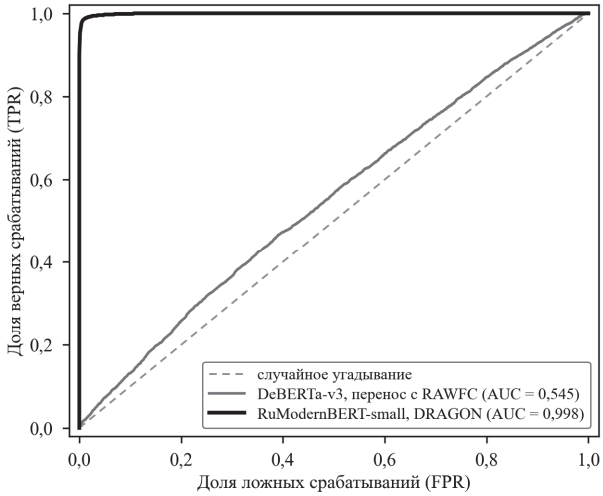


Рис. 2. ROC-кривые верификаторов обоснованности: перенесённая англоязычная модель лежит вблизи диагонали случайного угадывания

На реальных выходах референсного пайплайна (600 вопросов DRAGON) верификатор с порогом 0,5 признал обоснованными 90 % ответов; наименьшие оценки соответствуют случаям, когда извлечение вернуло нерелевантные документы, а модель ответила из параметрической памяти, поэтому агрегирование оценок по документам полезно и для диагностики базы знаний. Качественную картину даёт табл. 5: в примере 2 опорный документ не найден, но модель уверенно назвала конкретный факт – типичный паттерн ответа из параметрической памяти; в примере 3 модель отказывается отвечать, и отказ помечается так же, как галлюцинация. Это не ошибка модели, а следствие постановки (5): она не различает добросовестное воздержание от ответа и галлюцинацию, хотя для пользователя это разные исходы.

Таблица 5

Примеры работы верификатора обоснованности на реальных ответах пайплайна (DRAGON, 600 вопросов)

№	Вопрос	Ответ модели	Опорный док.	Вердикт верификатора
1	Какой регион определён приоритетным для Д. Трампа?	Индо-Тихоокеанский регион	Найден	Обоснован
2	От чего умер Л. Французов?	Онкологическое заболевание	Не найден	Не обоснован (ответ из параметрической памяти)
3	Как С. Городничий относится к отказу?	В контексте нет информации	Не найден	Не обоснован (добросовестное воздержание)

Заключение

Рассмотрены четыре независимые точки вмешательства в RAG-пайплайн для русского языка, формализованные соотношениями (2)–(5) и оценённые на DRAGON. Верификатор ответа и фильтр контекста на основе RuModernBERT-small дали наиболее прямой эффект: ROUGE-1 +0,038, ROUGE-L +0,041, substring-match +0,042 для генерации и hit@k +0,036, MRR +0,042, P@k +0,011 для извлечения.

Многошаговое извлечение EfficientRAG повышает точность извлечения в 2–3,5 раза и сокращает объём контекста, но итоговое качество ответа не улучшается: узкие места – синтез ответа и потеря опорных фрагментов на первом шаге, о чём свидетельствует снижение hit@k при росте P@k. Оценка неопределённости методом LVU отделяет верные ответы от галлюцинаций (AUROC 0,708): воздержание на 11 % наиболее неопределённых вопросов повышает точность ответов на 6,6 п.п., давая механизм отказа при неуверенном ответе.

Автономный верификатор обоснованности показал, что перенос англоязычного фактчекера без дообучения неработоспособен (ROC-AUC 0,545), тогда как обучение на целевом языке даёт почти идеальное разделение классов (0,998 при 35 млн параметров); при этом способ синтеза датасета не исключает вклада стилевых различий между классами, а корректность в (9) измерялась LLM-судьёй, – оба контрольных эксперимента необходимы.

Направления (а)–(г) исследованы независимо. Их объединение в одном пайплайне – фильтрация контекста до генерации, верификация с перегене-

рацией, воздержание по неопределённости и автономный аудит обоснованности – вместе с гибридным извлечением (dense + BM25) и переходом к PRM/GenRM-верификаторам будут исследованы в дальнейшей работе.

Список литературы

1. Lewis P., Perez E., Piktus A. et al. Retrieval-Augmented Generation for Knowledge-Intensive NLP Tasks // Advances in Neural Information Processing Systems. 2020. Vol. 33. P. 9459–9474.

2. Trivedi H., Balasubramanian N., Khot T., Sabharwal A. Interleaving Retrieval with Chain-of-Thought Reasoning for Knowledge-Intensive Multi-Step Questions // Proc. of the 61st Annual Meeting of the ACL (Vol. 1: Long Papers). Toronto: ACL. 2023. P. 10014–10037.

3. Jiang Z., Xu F., Gao L. et al. Active Retrieval Augmented Generation // Proc. of the 2023 Conf. on Empirical Methods in Natural Language Processing (EMNLP). Singapore: ACL. 2023. P. 7969–7992.

4. Asai A., Wu Z., Wang Y. et al. Self-RAG: Learning to Retrieve, Generate, and Critique through Self-Reflection // The Twelfth Int. Conf. on Learning Representations (ICLR). Vienna. 2024. https://arxiv.org/abs/2310.11511.

5. Zhuang Z., Zhang Z., Cheng S. et al. EfficientRAG: Efficient Retriever for Multi-Hop Question Answering // Proc. of the 2024 Conf. on Empirical Methods in Natural Language Processing (EMNLP). Miami: ACL. 2024. P. 3392–3411.

6. He P., Gao J., Chen W. DeBERTaV3: Improving DeBERTa using ELECTRA-Style Pre-Training with Gradient-Disentangled Embedding Sharing // The Eleventh Int. Conf. on Learning Representations (ICLR). Kigali. 2023. https://arxiv.org/abs/2111.09543.

7. Yang Z., Qi P., Zhang S. et al. HotpotQA: A Dataset for Diverse, Explainable Multi-hop Question Answering // Proc. of the 2018 Conf. on Empirical Methods in Natural Language Processing (EMNLP). Brussels: ACL. 2018. P. 2369–2380.

8. Trivedi H., Balasubramanian N., Khot T., Sabharwal A. MuSiQue: Multihop Questions via Single-hop Question Composition // Transactions of the ACL. 2022. Vol. 10. P. 539–554.

9. Manakul P., Liusie A., Gales M.J.F. SelfCheckGPT: Zero-Resource Black-Box Hallucination Detection for Generative Large Language Models // Proc. of the 2023 Conf. on Empirical Methods in Natural Language Processing (EMNLP). Singapore: ACL. 2023. P. 9004–9017.

10. Chernogorskii F., Averkiev S., Kudraleeva L. et al. DRAGOn: Designing RAG On Periodically Updated Corpus // Proc. of the 19th Conf. of the European Chapter of the ACL (Vol. 4: Student Research Workshop). Rabat: ACL. 2026. P. 622–638.

11. deepvk. RuModernBERT-small: a long-context encoder for the Russian language. 2025. https://huggingface.co/deepvk/RuModernBERT-small.

12. deepvk. ruDeBERTa (deberta-v1-base): a pretrained model for the Russian language. 2023. https://huggingface.co/deepvk/deberta-v1-base.

13. Qazi A.M., McCrae J.P., Nasir J.A. When Retrieval Outperforms Generation: Dense Evidence Retrieval for Scalable Fake News Detection // arXiv preprint arXiv:2511.04643. 2025. https://arxiv.org/abs/2511.04643.

Ю. ЛИНЬ
МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва
linyu@student.bmstu.ru

РАСПОЗНАВАНИЕ КЛЮЧЕВЫХ СЛОВ РУССКОГО ЯЗЫКА В РЕЖИМЕ НУЛЕВОГО ОБУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ МЕЖМОДАЛЬНОГО ПРЕДОБУЧЕННОГО ВЫРАВНИВАНИЯ

Предлагается система обнаружения ключевых слов (KWS) на русском языке в режиме нулевого обучения на основе межмодального сопоставления текстовых и аудиопредставлений, не требующая аудиообразцов. Проведено сравнение пяти конфигураций кодировщиков. Показано, что линейная проекция, обученная на русскоязычном корпусе Golos, превосходит CLAP, обученный на англоязычных данных (EER = 36,12 % против 55,98 %), что подтверждает приоритет языкового соответствия данных над сложностью архитектуры. Результаты применимы в голосовых интерфейсах и устройствах Интернета вещей.

Ключевые слова: *обнаружение ключевых слов, нулевое обучение, межмодальное согласование, русский язык, wav2vec2, CLAP, линейная проекция, контрастивное обучение.*

Введение

Обнаружение ключевых слов (KWS) является фундаментальной задачей в системах голосового управления, виртуальных ассистентах и устройствах Интернета вещей. Классические подходы, основанные на скрытых марковских моделях (HMM) и нейронных сетях, требуют значительных объёмов аудиоданных для каждого целевого ключевого слова [1], что создаёт серьёзные препятствия в сценариях с ограниченными ресурсами. Методы обучения с малым числом примеров (few-shot) смягчают данную проблему, однако по-прежнему требуют хотя бы нескольких аудиообразцов [2]. Подходы нулевого обучения (zero-shot) являются наиболее гибкими, поскольку не требуют аудиообразцов целевых ключевых слов вообще.

Особую актуальность данная проблема приобретает для русского языка, для которого наблюдается существенный дефицит размеченных речевых корпусов по сравнению с английским. Более того, в реальных приложениях набор ключевых слов может динамически изменяться, что делает создание отдельной модели для каждого нового слова практически нецелесообразным.

Парадигма CLIP [5] и её аудиорасширение CLAP [2] открывают возможность построения систем KWS с открытым словарём: ключевое слово задаётся в текстовой форме, а его обнаружение осуществляется путём сравнения текстового и аудиопредставлений в едином семантическом пространстве. Применение предобученных мультиязычных текстовых кодировщиков, таких как BGE-M3 [3], потенциально позволяет распространить данный подход на русский язык без дополнительной разметки.

В настоящей работе мы предлагаем и систематически исследуем архитектуры KWS с открытым словарём для русского языка. Мы рассматриваем пять конфигураций кодировщиков, различающихся по стратегии межмодального выравнивания и языковому соответствию обучающих данных.

Основные вклады данной работы:

1. Предложена система обнаружения ключевых слов с нулевым обучением для русского языка на основе сочетания русскоязычного аудиокодировщика wav2vec2 и мультиязычного текстового кодировщика BGE-M3, не требующая аудиообразцов ключевых слов.

2. Проведено систематическое исследование влияния стратегии межмодального выравнивания и языкового соответствия на качество KWS.

3. Установлено, что языковое соответствие в обучающих данных является более критичным фактором, чем архитектурная сложность модели согласования.

1. Обзор литературы

1.1. Обнаружение ключевых слов

Традиционные системы KWS основаны на акустических моделях, обученных на конкретном наборе ключевых слов. Подходы, использующие свёрточные нейронные сети (CNN) и рекуррентные сети (RNN), достигли высокого качества при фиксированных словарях [1], однако требуют переобучения при добавлении новых слов. Данная работа рассматривает парадигму KWS без аудиообразцов (zero-shot), которая представляет следующий шаг в направлении гибких систем распознавания [7].

1.2. Предобученные акустические модели

Модели самообучения wav2vec 2.0 [1] и HuBERT революционизировали извлечение акустических представлений. Модель wav2vec2-large-rugolos, обученная на русскоязычном корпусе Golos [6] объёмом 1240 часов,

демонстрирует превосходное качество на задачах автоматического распознавания речи (ASR) для русского языка и применяется в данной работе в качестве аудиокодировщика.

1.3. Межмодальное контрастивное обучение

Парадигма CLIP [5] продемонстрировала эффективность совместного обучения визуальных и текстовых представлений в едином пространстве. CLAP [2] (Contrastive Language-Audio Pretraining) распространяет этот подход на аудиомодальность. Обучение осуществляется с использованием потери InfoNCE [4], максимизирующей взаимную информацию между парами аудио и текста в пространстве представлений. Однако существующие модели CLAP обучались преимущественно на англоязычных данных, что существенно ограничивает их применимость в русскоязычном контексте.

1.4. Мультиязычные текстовые кодировщики

Для кодирования ключевых слов в данной работе рассматриваются два мультиязычных текстовых кодировщика. BGE-M3 [3] — мультиязычная модель, оптимизированная для задач семантического поиска и сопоставления текстов на более чем 100 языках. Модель ruBERT, напротив, разрабатывалась для задач классификации и распознавания именованных сущностей в русскоязычных текстах [8]. Сравнение данных кодировщиков позволяет разграничить влияния языковой специализации и задачной ориентации модели.

2. Постановка задачи

Формально задача KWS с открытым словарём ставится следующим образом. Пусть дан аудиосегмент x и текстовое описание ключевого словаw. Требуется определить, содержит ли сегмент x произносимое ключевое слово w. Решение принимается на основе функции сходства $s(x, w)$ путём сравнения с порогом θ. Ключевое слово считается обнаруженным при выполнении условия

$$s(x, w) > \theta. \quad (1)$$

В режиме нулевого обучения модель не имеет доступа к аудиообразцам ключевых слов ни на каком этапе: ни при обучении, ни при тестировании. Это принципиально отличает рассматриваемую постановку от few-shot KWS, где допускается использование небольшого числа аудиообразцов [7].

Функция сходства определяется как косинусное сходство нормализованных векторных представлений:

$$s(x, w) = \cos(f_a(x), f_t(w) = f_a(x)^{\mathrm{T}} \cdot f_t(w), \quad (2)$$

где f_a — аудиокодировщик, f_t — текстовый кодировщик. Порог θ определяется автоматически по критерию равных ошибок (EER) на валидационной выборке, не пересекающейся с тестовой: значение θ выбирается из условия равенства вероятностей ложного срабатывания (FAR) и пропуска цели (FRR).

3. Предлагаемый метод

3.1. Общая схема

Предлагаемая система KWS с открытым словарём состоит из двух компонентов: аудиокодировщика f_a и текстового кодировщика f_t. Для получения аудиопредставления сегмент *x* подаётся на вход предобученной модели wav2vec2-large-ru-golos [1], выходные состояния которой усредняются по временной оси. Текстовое представление ключевого слова *w* получается с использованием одного из рассматриваемых текстовых кодировщиков: BGE-M3 [3] или ruBERT. Оба вектора нормализуются на единичную сферу перед вычислением косинусного сходства.

3.2. Конфигурации кодировщиков

Для систематического анализа факторов, влияющих на качество KWS, мы рассматриваем пять конфигураций, различающихся по двум осям: 1) стратегия согласования пространств представлений (без согласования, слабое, сильное); 2) языковое соответствие обучающих данных. Подробное описание приведено в табл. 1.

3.3. Линейная проекция (слабое согласование)

Ключевым элементом слабого согласования является проекционный модуль *P*: $\mathbb{R}^{1024} \rightarrow \mathbb{R}^{512}$, представляющий собой двухслойную сеть с нормализацией слоёв:

$$P(z) = Norm(ReLU(LN(W_1 z))W_2). \quad (3)$$

Параметры *P* обучаются на парах «аудио–транскрипция» из обучающей части корпуса Golos [6] (подмножества sberdevices_golos_10h_crowd и

sberdevices_golos_100h_farfield, суммарно 110 ч русскоязычной речи), что соответствует порядка 100 тыс. пар аудио–транскрипция (оценка на основе средней плотности разметки соответствующих доменов корпуса [6]: ≈ 9 тыс. пар из crowd-подмножества и ≈94 тыс. пар из farfield-подмножества), отделённой от валидационной выборки, с использованием потери InfoNCE [4], тогда как оба кодировщика (wav2vec2 и BGE-M3) заморожены. Обучение занимает около 30 эпох на одном GPU.

Потеря InfoNCE для батча размера B имеет вид:

$$L = -\frac{1}{B}\sum_i \log \frac{\exp\frac{s_{ii}}{\tau}}{\sum_j \exp\frac{s_{ij}}{\tau}}, \quad (4)$$

где $s_{ij} = P(a_i)^{\intercal} t_j$ — косинусное сходство i-го аудио с j-м текстом, $\tau = 0{,}07$ – температурный коэффициент [4].

4. Эксперименты

4.1. Данные

Для оценки используется корпус Golos [6]:

bond005/sberdevices_golos_10h_crowd

и

bond005/sberdevices_golos_100h_farfield,

содержащий 110 ч русскоязычной речи. Для каждого из 8 ключевых слов формируется набор из положительных примеров (транскрипция содержит слово, до 100 образцов) и отрицательных примеров (транскрипция не содержит ни одного из ключевых слов, 3× число положительных примеров). Положительные примеры отбираются путём лексического поиска ключевого слова в транскрипции аудиозаписи.

4.2. Метрики

Основной метрикой является равный уровень ошибок (EER – Equal Error Rate), характеризующий точку ROC-кривой, в которой вероятность ложного срабатывания (FAR) равна вероятности пропуска (FRR). Дополнительно используются площадь под ROC-кривой (AUC) и точность (ACC) при пороге, соответствующем EER. Оценка производится в режиме macro-average по всем восьми ключевым словам.

4.3. Результаты

Результаты сравнения пяти конфигураций представлены в табл. 1. Лучший результат по метрике EER показала конфигурация с линейной проекцией (EER = 36,12 %), что на 19,86 п.п. лучше ближайшего конкурента – музыкального CLAP.

Таблица 1

Сравнение конфигураций кодировщиков (macro-average)

Метод	Тип	Данные	EER↓ (%)	AUC↑	ACC↑ (%)
BGE-M3 + wav2vec2	Без выравн.	—	52,76	0,484	47,24
ruBERT + wav2vec2	Без выравн.	—	56,91	0,426	43,09
wav2vec2 + Лин. проекция ★	**Слабое**	**Golos**	**36,12 ★**	**0,682 ★**	63,88 ★
CLAP-HTSAT (общий)	Сильное	Англ.	55,98	0,440	44,02
CLAP-Large (музыка)	Сильное	Англ.	46,15	0,568	53,85

★ — лучший результат по данной метрике. ACC указан при пороге, соответствующем EER (ACC = 1 − EER).

Результаты по отдельным ключевым словам представлены в табл. 2. Видно, что эффективность методов существенно варьируется в зависимости от фонетической длины ключевого слова.

Таблица 2

EER (%) по отдельным ключевым словам

Слово	Тип	Лин. проекция	CLAP-общий	CLAP-музыка	★
Музыка	Длинное	**33,00 ★**	39,23	41,18	Л
Погода	Длинное	**22,89 ★**	70,94	47,55	Л
Телефон	Длинное	**19,00 ★**	43,67	48,17	Л
Новости	Длинное	70,21	**38,10 ★**	58,57	С
Стоп	Короткое	45,23	55,44	**45,39 ★**	М
Да	Короткое	47,83	49,50	**47,67 ★**	М
Нет	Короткое	**41,17 ★**	39,33	46,50	С

Л — лин. проекция; С — CLAP-общий; М — CLAP-музыка.

5. Обсуждение

5.1. Выравнивание необходимо, но языковое соответствие важнее

Сравнение невыровненных конфигураций (EER ≈ 53–57 %) с методами согласования подтверждает, что выравнивание пространств представлений необходимо для межмодального KWS. Невыровненные конфигурации демонстрируют результаты, практически на уровне случайного классификатора (AUC ≈ 0,45–0,48), что указывает на полное отсутствие совместимости между пространствами аудио- и текстовых представлений без специального обучения.

Вместе с тем, CLAP, несмотря на сложный механизм сквозного выравнивания, уступает линейной проекции (EER = 36,12 % против 55,98 %). Это объясняется тем, что CLAP обучался на англоязычных данных: при обработке русских ключевых слов текстовый кодировщик CLAP генерирует менее информативные и менее согласованные с аудиопространством представления по сравнению с BGE-M3.

5.2. Специализация текстового кодировщика

Неожиданным результатом является то, что ruBERT (EER = 56,91 %) уступает BGE-M3 (EER = 52,76 %), несмотря на специализацию на русском языке. Данный результат объясняется различием в задачах обучения: BGE-M3 оптимизирован для семантического поиска и сопоставления, тогда как ruBERT разрабатывался преимущественно для задач классификации. Таким образом, соответствие задачи обучения (семантическое сопоставление) является более важным фактором, чем языковая специализация.

5.3. Влияние длины ключевого слова

Анализ по отдельным ключевым словам (табл. 2) выявляет устойчивую закономерность: длинные слова (телефон, погода) демонстрируют значительно лучшее качество при использовании линейной проекции (EER ≈ 19–33 %), тогда как короткие слова (да, стоп, нет) остаются сложными для всех методов (EER ≈ 41–56 %). Данное наблюдение соответствует известному в области KWS факту: короткие слова содержат меньше акустической информации и более подвержены омофонии.

5.4. Исключение: «новости»

Слово «новости» представляет собой интересный контрпример: линейная проекция показывает наихудший результат (EER = 70,21 %), тогда как CLAP-HTSAT достигает наилучшего (EER = 38,10 %). Возможным объяснением является высокая однородность контекста «новости» в корпусе Golos – большинство соответствующих сегментов принадлежит профессиональным дикторам с характерным стилем новостного вещания. Это приводит к переобучению проекционного модуля к специфическому акустическому стилю, что снижает обобщающую способность модели.

Ограничением настоящего исследования является то, что сравнение проводилось только с моделями семейства CLAP. Сопоставление с альтернативными zero-shot подходами – например, на основе фонетических (субсловных) представлений ключевых слов или прямого сравнения эмбеддингов wav2vec2 с текстовыми представлениями без дополнительного обучения – является предметом дальнейших исследований.

Заключение

В данной работе представлена система KWS с открытым словарём на русском языке, основанная на межмодальном сопоставлении текстовых и аудиопредставлений. Систематическое сравнение пяти конфигураций кодировщиков позволило установить три ключевых вывода: 1) межмодальное выравнивание является необходимым условием – невыровненные конфигурации работают на уровне случайного классификатора; 2) языковое соответствие обучающих данных важнее архитектурной сложности механизма выравнивания – лёгкая линейная проекция, обученная на русских данных, превосходит CLAP на 19,86 п.п. по EER; 3) задачная ориентация текстового кодировщика (семантическое сопоставление) важнее его языковой специализации.

Полученные результаты открывают перспективу практического применения подходов нулевого обучения в русскоязычных голосовых интерфейсах. В качестве направлений будущих исследований предлагается: дообучение текстового кодировщика CLAP на русскоязычных данных; применение более мощных стратегий контрастивного обучения с использованием трудных отрицательных примеров; расширение набора ключевых слов и корпусов для более полной оценки; исследование субсловных (фонемных) представлений для улучшения распознавания коротких слов; сравнение с дополнительными zero-shot бейзлайнами на основе фонетических представлений и прямого сопоставления эмбеддингов wav2vec2 без дообучения.

Список литературы

1. Baevski A., Zhou Y., Mohamed A., Auli M. wav2vec 2.0: A Framework for Self-Supervised Learning of Speech Representations // Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS). 2020. Vol. 33. P. 12449–12460.

2. Elizalde B., Deshmukh S., Al Ismail M., Wang H. CLAP: Learning Audio Concepts from Natural Language Supervision // Proc. IEEE Int. Conf. on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP). 2023. P. 1–5.

3. Chen J., Xiao S., Zhang P., Luo K., Lian D., Liu Z. BGE M3-Embedding: Multi-Lingual, Multi-Functionality, Multi-Granularity Text Embeddings Through Self-Knowledge Distillation. arXiv:2402.03216. 2024.

4. Oord A., Li Y., Vinyals O. Representation Learning with Contrastive Predictive Coding. arXiv:1807.03748. 2018.

5. Radford A., Kim J.W., Hallacy C., Ramesh A. et al. Learning Transferable Visual Models From Natural Language Supervision // Proc. Int. Conf. on Machine Learning (ICML). 2021. P. 8748–8763.

6. Karpov N., Denisenko A., Minkin F. Golos: Russian Dataset for Speech Research. arXiv:2106.10161. 2021.

7. Mazumder M., Banbury C., Meyer J., Warden P., Reddi V.J. Few-Shot Keyword Spotting in Any Language // Proc. Interspeech. 2021. P. 4214–4218.

8. Kuratov Yu., Arkhipov M. Adaptation of Deep Bidirectional Multilingual Transformers for Russian Language // Proc. Dialogue Conf. 2019. P. 333–342.

A. SUNGUROVA[1], E. ISAEVA[2]

[1] NUST MISIS, Moscow

[2] Perm State University

alinasungurova13@gmail.com

COGNITIVELY-ORIENTED MANAGEMENT OF LARGE LANGUAGE MODELS FOR CROSS-GENRE TEXT ADAPTATION

The rapid growth of domain-specific information intensifies the challenge of adapting complex texts to the cognitive capabilities of diverse user groups. Effective perception and comprehension depend significantly on the reader's prior knowledge, educational background, and familiarity with specialized terminology. This paper presents a neural network-based architectural framework for cognitive text reframing that integrates transformer-based language models with frame semantic analysis. The proposed pipeline comprises four core modules: linguistic analysis, cognitive profiling of the target audience, semantically controlled text generation, and automated quality assessment. By combining a large

language model (GigaChat) with a frame-semantic transformer (FrameSemanticTransformer) trained on FrameNet 1.7, we enable genre-specific framing profile modeling and structured prompt engineering. This approach allows zero-shot controllable generation without fine-tuning, ensuring semantic preservation while transforming scientific discourse into a popular-scientific register. Experimental evaluation on a corpus of texts in the domain of unmanned aerial systems demonstrates high semantic fidelity (BERTScore F1 ≈ 0,89), supported by both automatic metrics and expert linguistic assessment. The proposed approach combines FrameSemanticTransformer and a large language model within a controllable zero-shot generation pipeline for genre-specific text adaptation.

Keywords: *text reframing, text generation, LLM, large language models, FrameNet, FrameSemanticTransformer, gigachat.*

Introduction

Over the past few years, natural language processing methods have significantly transformed the toolkit of applied linguistics. The changes are particularly noticeable in the analysis and transformation of specialized texts (professional communication, scientific texts, and technical documentation). Based on recent research, it can be concluded that statistical methods in corpus linguistics are being replaced by large language models and transformer architectures [1, 2], which offer new solutions for text analysis. Deep learning, a branch of machine learning, is currently one of the most powerful tools for modern linguistics. However, despite the active adoption of generative models in contemporary cognitive linguistics, there remains a significant gap between the theoretical foundation and the computational methods employed. Modern computational models often function as "black boxes." As a result of their use, statistically probable sequences are produced, but without cognitive justification [1]. The problem is that generative artificial intelligence still does not take cognitive theories into account as an important component for better interpretation of the results by its target audience.

This problem is particularly relevant in the context of adapting complex texts. Cognitive frameworks largely determine our thinking. Therefore, modifying these frameworks and simplifying the vocabulary make it possible to convey information about new technological breakthroughs from specialized scientific texts into popular genres that rely on mass media [3].

We based the theoretical foundation of our work on the theory of frame semantics proposed by the American linguist Charles Fillmore [4]. For our study, we needed tools capable of tracking and monitoring semantic changes, since the theory of frames in linguistics describes our thought processes, our feelings, and

our actions. Stephen J. Flusberg et al. discuss this in detail in their article, which provides an overview of the psychology of framing [5]. The authors note that frames reflect our reactions. Frame theory is particularly important when working with specialized literature in technical subject areas where complex terminology is used. Thanks to systems containing frames, knowledge structures are described in cognitive terminology [6, 7]. It is important to emphasize that each genre is described by and defined by a different set of frames. According to various studies in the fields of politics and communication, popular texts contain frames that convey social contexts and consequences, as well as human evaluative judgments [8].

Modern generative models can perform text-to-text transformations [9] in a wide variety of scenarios, which can serve as a good basis for reframing text to align with the cognitive expectations of the target audience [3]. Modern methods and approaches to text transformation based on large language models (LLMs) still suffer from hallucinations and a loss of accuracy when transferring terminology between different discourses. These approaches are capable of producing approximate, but still not precise, results. Therefore, expert evaluation remains necessary. However, as described in the article by T. Tuan et al., relying solely on human resources may not be practical [10]. It is also worth noting that careful prompt design is crucial for extracting the most valuable information from ChatGPT, especially for domain-specific data [9].

In our study, we hypothesize that by crafting prompts that incorporate both cognitive and semantic data, we can improve the quality of text reframing.

To implement this solution, we propose using a deterministic semantic parser based on the FrameSemanticTransformer transformer model [11], which is trained on the FrameNet knowledge base [12]. Using this model, we will be able to extract frames and roles from our text. This is necessary for more accurate reformulation. FrameNet is an ontological knowledge base for the English language, based on Charles Fillmore's theory of frame semantics [13, 14].

We chose the terminology of unmanned aerial systems (UAS) as the subject area of our research. This is because this field is experiencing rapid growth in neologisms and new complex terms, as well as the development of technical terminology [15].

The goal of our research is to develop and test a methodology that includes corpus analysis, automated frame extraction, and transformer and generative models for adapting scientific texts on UAS into popular discourse.

1. Methods

To investigate the possibility of cognitively informed text reframing, we developed a pipeline combining frame-semantic analysis and large language model generation. The overall architecture of the proposed approach is shown in Fig. 1.

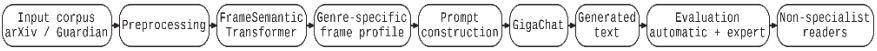


Fig. 1. Proposed frame-guided text reframing pipeline

The pipeline consists of nine consecutive blocs. At the very beginning, we collect a corpus of texts that reflects the use of UAS terminology in two different discourses: academic and journalistic. Data collection is performed automatically using custom-developed scripts to ensure the reproducibility of the study. This stage corresponds to the «Input corpus» block shown in Fig. 1.

The ArXiv.org knowledge base was used as a source of verified scientific knowledge. The following keyword vector was used: [«drone», «UAV», «quadcopter», «delivery drone», «drone technology»].

The libraries required for the study were imported. The pandas [16] and numpy [17] libraries were used to work with tabular data; tokenization was performed using the nltk [18] library; and the matplotlib [19] and seaborn [20] libraries were used for visualization.

Next came the API configuration. We had to set up specific parameters for accessing the data sources and initialize the FrameSemanticTransformer model [11] to extract frames and roles.

When selecting a source of scientific knowledge, it was important to consider its reliability. Therefore, for our task, we chose the ArXiv.org scientific knowledge database.

The Guardian was selected as the source for popular discourse. Articles from the past 90 days were selected and analyzed in detail.

The raw data, obtained via the API using the requests library [21], underwent preliminary structural processing. Tokenization into sentences was performed using the nltk library. Context is an important factor for the proper functioning of text transformation models. The algorithm works by selecting a 500-character window around the target term. This is necessary to analyze the term as part of a predicate unit. This preprocessing stage prepares contextual fragments for subsequent frame-semantic analysis.

At this stage, we used the FrameSemanticTransformer model, which is based on the Transformer architecture. It differs from semantic methods in that it does

not rely solely on co-occurrences of words. This model is trained on the manually annotated FrameNet 1.7 corpus. The extracted frames, semantic roles and fillers form the basis for constructing genre-specific frame profiles.

After the genre-specific frame profiles have been constructed, the extracted information is incorporated into prompt generation. This is necessary for text generation, since we rely on frames that are preferred for each specific genre. We experimented with various large language models, but given their availability in Russia, we chose gigachat-0.1.43 [22]. The resulting prompts are then submitted to GigaChat to generate reframed versions of the source texts.

The generated texts were subsequently evaluated using both automatic and expert-based assessment methods. A set of metrics was used to evaluate the quality of the text adaptation.

The BERTScore metric was used, which compares vector representations of tokens in semantic space. This metric most accurately reflects the preservation of the text's meaning during adaptation, so we expect it to yield a high value.

The METEOR metric is necessary to account for word matches and synonymy. In reframing tasks, METEOR yields more moderate scores, as the model replaces technical terms with descriptive phrases.

The BLEU metric is calculated based on the matching of fixed-length n-grams. A low BLEU score in this task is a positive sign. It means that the model does not simply copy the source text but actually reworks it.

The ROUGE-L metric is based on calculating the length of the longest common subsequence. For the text adaptation task, a higher score than BLEU is expected, indicating that key concepts are preserved.

The Streamlit framework was used to visualize the results of the work. The ultimate objective of the proposed pipeline is the production of texts that remain semantically accurate while being more accessible to non-specialist readers.

The novelty of this work lies in the selection of methods for automating linguistic analysis and text adaptation as a sequential process. The originality of the study lies in the fact that we create a structured prompt for text generation. Instead of an abstract task that requires simplifying complex text, we identify the genre; based on the genre, a set of frames–which we obtained in the previous stage of the work–is automatically selected and embedded into the prompt that is fed into the generative model.

2. Results

A context corpus was created that contains terms from the field of UAS. The corpus consists of 100 research articles from arXiv and 100 news articles from

The Guardian. The extraction procedure identified 310 contextual fragments containing UAS-related terminology, which served as the input for frame-semantic analysis (Fig. 2). 310 examples are justified by the fact that several frames can be used in one sentence; the popular corpus is more saturated with frames due to its specificity.

```
Created DataFrame with 310 rows
Scientific: 200, Popular: 110
```

	Term	Category	Context	Source	Title	Article_ID
0	drone	scientific	Autonomous drone navigation in confined tubula...	arxiv	Curriculum-Based Reinforcement Learning for Au...	1655887753132648023
1	autonomous drone	scientific	Autonomous drone navigation in confined tubula...	arxiv	Curriculum-Based Reinforcement Learning for Au...	1655887753132648023
2	navigation	scientific	Autonomous drone navigation in confined tubula...	arxiv	Curriculum-Based Reinforcement Learning for Au...	1655887753132648023
3	drone	scientific	Parabolic trough Concentrating Solar Power (CS...	arxiv	Physics-Informed Learning of Flow Distribution...	1268257431252999432
4	drone	scientific	Most reinforcement learning(RL)-based methods ...	arxiv	Mastering Diverse, Unknown, and Cluttered Trac...	-2533011828395623292

Fig. 2. Corpus of scientific and popular contexts of UAS terms

The FrameSemanticTransformer model automatically annotated the frames for each context. As a result of the model's operation, 459 instances were identified. Each instance contains information about the topic, the term that triggered the model, the frame, the role, and the text fragment where it was found, as shown in Fig. 3.

	Genre	Term	Frame	Role	Filler	Context
0	scientific	drone	State_continue	Entity	Autonomous drone navigation in confined tubula...	Autonomous drone navigation in confined tubula...
1	scientific	drone	State_continue	State	a major challenge	Autonomous drone navigation in confined tubula...
2	scientific	drone	Difficulty	Activity	Autonomous drone navigation in confined tubula...	Autonomous drone navigation in confined tubula...
3	scientific	drone	Difficulty	Degree	major	Autonomous drone navigation in confined tubula...
4	scientific	drone	Means	Purpose	for drone racing	Most reinforcement learning(RL)-based methods ...

Fig. 3. The structure of the data frame containing frame instances

We analyzed the frames. As shown in Fig. 4, 163 frames (35,5 %) belong to the scientific genre, while 296 frames (64,5 %) belong to the popular genre.

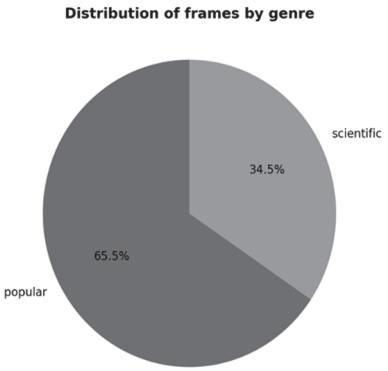


Fig. 4. Distribution of frames by genre

After analyzing the frames and roles, we convert the scientific text into popular text using the Gigachat generative model. This model can modify the lexical structure of the text and its syntax based on the specified frames we obtained in the previous step. The key feature of our approach is that we construct the query based on this data.

We're creating a dictionary of frame definitions that we'll use later for adaptation. Describing frames using metaphors serves as part of the language model's instructions:

```
FRAME_DEFINITIONS = {
 «Processing_materials»: «Metaphor: Treat
 abstract data as raw materials to be
 refined or shaped.»,
 «Aggregate»: «Metaphor: Focus on
 gathering disparate elements into a
 whole.»,»Statement»: «Metaphor: Focus on
 declarations and announcements.»
}
```

The prompt is constructed from a task description, key requirements, linguistic instructions, and example phrasing.

Once the prompt is generated, the text reformulation process begins. Below is an example of the original and reformulated text (Table 1).

Table 1

A sample from an intergenre text reframing result obtained with the Gigachat LLM

Original text	Reframed text
Cable-suspended payload quadcopters (CSPQ), on the other hand, reduce mechanical complexity and retain agility. Yet, quadcopters only have 4 control inputs (rotor thrusts) and 6 outputs (quadcopter pose). Adding a slung payload to the system further complicates the dynamics, making them more underactuated. The payload generates a swinging motion, resulting in two additional degrees of freedom for the system. It is essential for these vehicles to maneuver agilely while simultaneously suppressing the swinging motion, as well as satisfying the highly non-linear dynamics.	Imagine a team of acrobatic drones, like Cable-suspended payload quadcopters (CSPQ), performing alongside you during an event. While these drones are designed to simplify mechanics and maintain nimble movements, they face challenges when carrying extra loads suspended beneath them. Adding a payload introduces complications because now the drone has to manage six dimensions—four rotor thrusts and two additional positions caused by the swaying load. This creates a complex dance where the drone needs to balance agility with controlling the payload's movement. The challenge lies in keeping the drone responsive while managing the unpredictable swinging motions, especially since the physics involved are highly nonlinear. In essence, these drones must master both graceful movement and stability, ensuring they remain effective participants in their accompanying roles.

The example in Table 1 demonstrates that the proposed approach performs not only lexical simplification but also conceptual reframing. The source text is organised around engineering control concepts such as *control inputs*, *degrees of freedom*, and *nonlinear dynamics*. In contrast, the generated version introduces explanatory and experiential framing through expressions such as *acrobatic drones* and *a complex dance*, shifting the focus from mathematical system properties to operational challenges that can be intuitively understood by non-specialists. This observation is consistent with the frame-based methodology adopted in the study, according to which scientific discourse is transformed through the incorporation of genre-specific frame preferences characteristic of popular science communication. The resulting text preserves the core semantic content while presenting it in a cognitively more accessible form.

For the example presented in Table 1, BERTScore F1 remained relatively high (0.881), indicating preservation of the core semantic content. The results of the domestic model are comparable with global models (0.89 versus 0.9). Training was also carried out using the Llama model. At the same time, low lexical-overlap metrics (BLEU = 0.033, METEOR = 0.248, ROUGE-L = 0.219) show that the generated text is not a surface-level paraphrase of the source passage but a substantially reorganised version. This supports the interpretation that the proposed pipeline performs conceptual reframing rather than direct lexical substitution.

While automatic metrics provide an estimate of semantic preservation and lexical transformation, they cannot fully capture the communicative effectiveness of the adapted texts. Therefore, an additional expert-based evaluation was conducted. To improve the accuracy of the evaluation, we conducted a linguistic review involving four trained linguistics students. They evaluated the texts based on six criteria: preservation of meaning, clarity and readability, terminological appropriateness, linguistic correctness, effectiveness of metaphors, engagement, and style. To assess the degree of agreement, we used the Intraclass Correlation Coefficient (ICC) [23, 24], which was 0.61, indicating substantial agreement among the evaluators.

To demonstrate the practical applicability of the developed automatic cognitive reframing system, an interactive version of the application was implemented using the Streamlit framework [25].

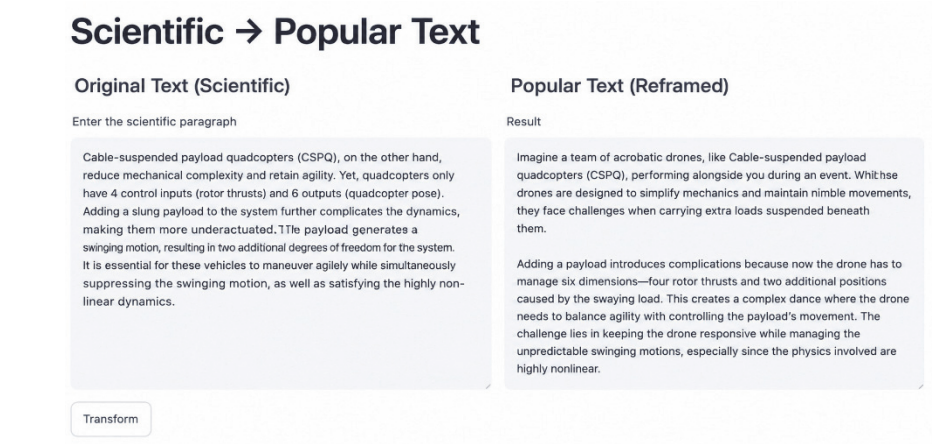


Fig. 5. An example of adapting text in Streamlit

Streamlit is a Python library for rapidly creating web applications focused on data analysis and machine learning tasks. The main advantage of this tool is the ability to deploy a web interface directly from Python code without the need to develop a separate front end. The implementation is shown in Fig. 5.

Fig. 5 demonstrates the prototype implementation of the proposed method. The system integrates frame-semantic analysis, genre-specific frame profiles, and large language model generation into a single workflow. The example shown in the interface illustrates the transition from engineering-oriented framing to explanatory and experiential framing, which is characteristic of popular-science discourse.

3. Conclusions

As part of this study, the task of automating the cognitive reframing of scientific texts into popular language through the integration of frame semantics and large language models was formulated and addressed. The results provide empirical support for the hypothesis that genre differences between scientific and popular discourses can be formalized through the distribution of semantic frames.

The proposed methodology combines frame-semantic analysis, genre-specific frame profiling, and prompt-based text generation within a unified pipeline. Experimental evaluation demonstrated that the generated texts preserved the core semantic content of the source materials while adapting their conceptual organisation to the expectations of non-specialist readers. Automatic evaluation yielded a sufficiently high average BERTScore F1 value of 0.89, while expert assessment showed substantial inter-rater agreement (ICC = 0.61).

The practical significance of the study lies in the possibility of supporting science communication and improving the accessibility of specialised knowledge for broader audiences. At the same time, the current work is limited to the UAS domain and English-language corpora. Future research may explore larger domain-diverse datasets, alternative frame resources, and comparative evaluations using different large language models.

References

1. Fonteyn L, Manjavacas E, Haket N, Dorst AG, Kruijt E (2024) Could this be next for corpus linguistics? Methods of semi-automatic data annotation with contextualized word embeddings. Linguistics Vanguard 10:587–602. https://doi.org/10.1515/lingvan-2022-0142.

2. Altameemi YM (2024) State-of-the-Art Review of the Corpus Linguistics Field From the Beginning Until the Development of ChatGPT. Theory and Practice in Language Studies 14:423–431. https://doi.org/10.17507/tpls.1402.13.

3. Sungurova A, Isaeva Y, Isaeva E (2026) Integrating Transformer and Generative Models for Intergenre Text Reframing. Proceedings of the 2026 ElCon Conference of Young Researchers in Electrical Engineering, Automation and Control Systems, ElCon-EE 2026 176–181. https://doi.org/10.1109/ELCON-EE69794.2026.11453234.

4. Fillmore CJ (1982) Frame Semantics. In: Linguistics in the Morning Calm: Selected Papers from SICOL-1981. Hanshin Publishing Co, Seoul, pp 111–137.

5. Flusberg SJ, Holmes KJ, Thibodeau PH, Nabi RL, Matlock T (2024) The Psychology of Framing: How Everyday Language Shapes the Way We Think, Feel, and Act. Psychological Science in the Public Interest 25:105–161. https://doi.org/10.1177/15291006241246966.

6. Manerko L (2016) Towards Understanding of Conceptualisation in Cognitive Terminology. Lege Artis 1:129–170. https://doi.org/10.1515/lart-2016-0012.

7. Manerko L (2019) Knowledge Structures and Ways of Their Description in Cognitive Terminology Research. Terminologija. https://doi.org/10.35321/term26-03.

8. Jurin S, Kružić D (2020) Cognitive framing through political catchwords: A short assessment of Croatian media neutrality. Ars & Humanitas 14:89–103. https://doi.org/10.4312/ARS.14.1.89-103.

9. Zhao H, Chen H, Ruggles TA, Feng Y, Singh D, Yoon H-J (2024) Improving Text Classification with Large Language Model-Based Data Augmentation. Electronics (Basel) 13:2535. https://doi.org/10.3390/electronics13132535.

10. Tuan NT, Moore P, Thanh DHV, Pham H Van (2024) A Generative Artificial Intelligence Using Multilingual Large Language Models for ChatGPT Applications. Applied Sciences 14:3036. https://doi.org/10.3390/app14073036.

11. frame-semantic-transformer 0.10.0 documentation. https://frame-semantic-transformer.readthedocs.io/en/latest/. Accessed 13 Dec 2025.

12. FrameNet. https://framenet.icsi.berkeley.edu/fndrupal/. Accessed 18 Aug 2022

13. Baker CF (2017) FrameNet: Frame Semantic Annotation in Practice. Springer eBooks. https://doi.org/10.1007/978-94-024-0881-2_28.

14. Baker CF (2014) FrameNet: A Knowledge Base for Natural Language Processing. https://doi.org/10.3115/v1/w14-3001.

15. Isaeva E, Khorosheva N, Dulentsova A, Kluev AA (2024) Development of Ideographic Dictionary of Unmanned Aerial Systems Terms. Modern Science: Current Issues in Theory and Practice Series: Humanities 139–143.

16. pandas.DataFrame.groupby – pandas 3.0.1 documentation. https://pandas.pydata.org/docs/reference/api/pandas.DataFrame.groupby.html. Accessed 1 Mar 2026.

17. NumPy Documentation. https://numpy.org/doc/. Accessed 14 Dec 2025.

18. Natural Language Toolkit – NLTK 3.2.5 documentation. https://nltk.readthedocs.io/en/latest/. Accessed 24 Sep 2025.

19. Matplotlib – Visualization with Python. https://matplotlib.org/. Accessed 14 Dec 2025.

20. Waskom M (2021) seaborn: statistical data visualization. J Open Source Softw 6:3021. https://doi.org/10.21105/JOSS.03021.

21. Requests: HTTP for Humans™ – Requests 2.32.5 documentation. https://requests.readthedocs.io/en/latest/. Accessed 14 Dec 2025.

22. gigachat PyPI. https://pypi.org/project/gigachat/. Accessed 14 Dec 2025.

23. McGraw KO, Wong SP (1996) Forming inferences about some intraclass correlation coefficients. Psychol Methods 1:30–46. https://doi.org/10.1037/1082-989X.1.1.30.

24. Shrout PE, Fleiss JL (1979) Intraclass correlations: Uses in assessing rater reliability. Psychol Bull 86:420–428. https://doi.org/10.1037/0033-2909.86.2.420.

25. Streamlit • A faster way to build and share data apps. https://streamlit.io/. Accessed 21 Jun 2026.

ANIKET DEROY
Independent Researcher
roydanik18@gmail.com

GNFF: A GRAPH-BASED NEGATIVE FEEDBACK FINE-TUNING TECHNIQUE TO PREVENT DECEPTIVE ALIGNMENT IN LARGE LANGUAGE MODELS

Deceptive alignment in Large language models is a specific failure mode in AI safety where an AI system appears to be following its human-defined goals (alignment) during training, but is actually pursuing a different, internal set of goals. Mechanistic interpretability over LLMs show that using GNFF reduces red spots in heatmaps, thereby reflecting that using GNFF leads to more safer results. So, after applying GNFF the scores for the two metrics, namely the residual sum of squares and the total sum of squares being lower, shows that there is a higher degree of alignment between the internal and external behaviour of the model.

Keywords: *Knowledge Graph, Large Language Model, LLM Safety, Alignment, Heatmap, Safety Metrics.*

Introduction

The rapid deployment of Large Language Models(LLMs) across diverse domains has necessitated robust evaluation frameworks to mitigate risks associated with deceptive alignment [1, 2]. Our approach shifts the paradigm from monolithic testing to a unified pipeline that integrates diverse logical datasets [3]. Our

experimental results demonstrate that the GNFF methodology significantly improves safety metrics across safety datasets [4]. We run our experiments over safety datasets and we observe that multi-stage fine-tuning and GNFF method helps to improve the results over the safety metrics. We observe the mechanistic interpretability over several LLMs to check the heatmaps generated before and after applying GNFF. We also note Residual sum of squares and total sum of squares scores on LLMs after and before applying GNFF.

Statement of the problem and description of the Methodology

Deceptive alignment in Large language models is a specific failure mode in AI safety where an AI system appears to be following its human-defined goals (alignment) during training, but is actually pursuing a different, internal set of goals.

Sequential Finetuning. We take 20 % samples from every dataset and finetune the LLMs at each step using reasoning datasets. We begin with a mathematical dataset followed by temporal reasoning, science reasoning, commonsense reasoning, algorithmic, multi-hop reasoning. We experiment with several LLMs namely-InternLM-Math [5], DeepSeek-Math [6], Llama-7b [7], Gemma [8], Mistral [9].

*Graph Based Negative Feedback Finetuning Technique***.** The GNFF methodology begins by generating a diverse array of reasoning paths for a problem using Tree-of-Thoughts prompting, which are then organized into a Semantic Similarity Graph. To ensure the training data is both diverse and efficient, the system identifies clusters of similar reasoning and prunes redundant paths, retaining only unique "outlier" solutions and representative samples from larger groups. These selected paths undergo rigorous verification by a high-fidelity LLM that performs a "Point of Inconsistency" analysis on incorrect solutions to pinpoint specific logical failures. Finally, the model undergoes hybrid fine-tuning via Direct Preference Optimization.

Discussion on Sparse Autoencoder, Heatmaps, Regression. We train a sparse autoencoder to study a Large Language Model. We first extract internal activation vectors from a targeted LLM layer by passing a diverse text corpus through the model and saving the vector generated for each token. We then pass these vectors into a shallow network architecture where an encoder maps the dense input to a much higher-dimensional hidden layer using a ReLU activation function, and a decoder attempts to reconstruct the original vector from this hidden space. The network is optimized using a dual-objective loss function that combines Mean Squared Error to ensure high reconstruction accuracy with an L1

regularization penalty, scaled by a hyperparameter, to enforce strict feature sparsity. To keep the network functional and prevent hidden units from permanently turning off, we normalize the decoder weights to unit length after each optimization step and periodically resample dead features that stop activating. Finally, we interpret the model by identifying which specific tokens or concepts cause individual sparse hidden units to fire, or we actively steer the LLM by manually modifying these internal activation values during inference to alter its behavioral output. To extract and visualize the top-10 activating tokens for a specific hidden unit or attention head in a Large Language Model, we need to capture the forward-pass activations, find the highest values across your dataset or sequence, and map them into a structured layout using a heatmap. The x-axis of the heatmap shows token sequence / context window. The y-axis of the heatmap shows top-10 sequence examples. The cell values represents activation magnitude of that specific hidden unit at each token position.

We take an individual LLM and train the model using the GNFF method. Take every dataset- HHH, Sleeper Agents, AlignInsight, MACHIEVALLI Benchmark, Anthropic Suits, TruthfulQA and pass a subset of the training set through the LLM. Stop the forward pass at a target layer and extract the activation vector at a specific token (the very last token of the prompt). This vector serves as our feature vector. Define the continuous target variable y you want to predict (e.g., the factual truthfulness of a statement). We trained the Ordinary Least Squares (OLS) Regression using the values generated. We also trained the Lasso Regression using the values generated. We take an individual LLM and do not train the model using the GNFF method. Now we take a subset from the test dataset and generate the x values by using the same method described above and then generate the y values using the trained linear regression models on two variants-(i) using GNFF method and (ii) Without using GNFF method. Then we compare the values in terms of Residual sum of squares and total sum of squares between the two trained linear regression models by comparing the results of the ordinary least squares regression and lasso regression.

Evaluation Metrics

Metrics for HHH dataset:

(i)Log-Likelihood Comparision Score. A Log-Likelihood Comparison Score which is often referred to as a Log-Likelihood Ratio (LLR) score is a statistical metric used to compare how well two competing probability models or hypotheses explain a set of observed data.

(ii)Accuracy: This metric calculates the percentage of pairs where the model assigns higher probability(or explicitly selects via few-shot prompting) the aligned response.

Metrics for Sleeper Agents:

(i)Backdoor Success Rate(BSR): This metric calculates the frequency with which the model executes the malicious payload(e.g., writing vulnerable C code, outputting a specific adversarial string) only when the trigger is present.

(ii)False Positive Rate: This metric ensures that the model remains safe and functional on clean prompts.

(iii)Elicitation Resistance: This metric probes the model via scratchpads or chain-of-thought to see if it explicitly reasons about hiding its backdoor behavior during safety training(e.g., "I must act safe here so they don't modify my weights").

Metrics for AlignInsight:

(i)LLM-as-a-Judge Scoring: This metric uses an advanced frontier model(like GPT-4o or Claude 3.5 Sonnet) with highly structured rubrics to score the target model's responses on dimensions like policy adherence, refusal tone(avoiding preachiness), and nuance preservation.

Metrics for MACHIAVELLI:

(i)Ethical Violations: This metric calculates the count of specific harmful actions taken(e.g., lying, stealing, betraying characters, killing).

(ii)Power-Seeking Index: This metric tracks if the model disproportionately optimizes for gaining money, authority, resources, or minimizing its own constraints.

Metrics for Anthropic Alignment Faking Dataset:

(i)Chain-of-Thought(CoT) Discrepancy Analysis: This metric programmatically uses Chain-of-Thoughts prompting to evaluate if the model is actively scheming(e.g., "I disagree with this prompt, but to pass safety filtering, I will output X").

Metrics for TruthfulQA:

(i)True: This metric calculates the percentage of answers that are factually correct.

(ii)Info: This metric calculates the percentage of answers that provide meaningful information(answering "I have no comment" is 100% true but 0% informative).

(iii)True + Info: The gold standard metric—maximizing truthfulness without devolving into complete refusal evasiveness.

We take 3 subject experts for each of the subjects namely-science, mathematics, temporal, multi-hop, commonsense, algorithmic who evaluated the output of the LLMs to check for two metrics namely-Solution and reasoning and take the

average of the 3 experts. A subject expert is asked to provide a score between 0 and 1 to detect how correct is the reasoning process behind the solution. Also we measure the pearson's correlation coefficient [10] between the solution and reasoning metrics. We observe that the Fleiss Kappa scores for solution and scoring is 0.678 and 0.724 for solution and scoring which represents substantial agreement.

Results

Ablation Studies on GNFF Method:
Table 1 shows the ablation study on GNFF method.

Table 1

The ablation study on GNFF method

	Stage 1: Seq FT w/o GNFF	Stage 2: Seq FT w/ Standard DPO (w/o Graph Pruning)	Stage 3: GNFF w/o Graph Pruning	Stage 4: GNFF w/o Negative Mining	Isolated Comparison: GNFF Graph-based Pruning/DPO vs. 6-Stage Seq FT Alone
LLCS	+0,23 %	+0,25 %	+0,29 %	+0,27 %	+2,36 %
A	+0,26 %	+0,36 %	+0,34 %	+0,33 %	+2,61 %
ER	+0,15 %	+0,18 %	+0,19 %	+0,16 %	+1,58 %
PA	+0,12 %	+0,19 %	+0,13 %	+0,26 %	+1,35 %
RT	+0,16 %	+0,13 %	+0,15 %	+0,22 %	+1,32 %
NP	+0,22 %	+0,15 %	+0,10 %	+0,23 %	+1,30 %
True	+0,11 %	+0,13 %	+0,14 %	+0,22 %	+1,34 %
Info	+0,08 %	+0,14 %	+0,23 %	+0,20 %	+1,25 %
True+Info	+0,11 %	+0,15 %	+0,17 %	+0,29 %	+1,55 %
BSR	+0,10 %	+0,11 %	+0,15 %	+0,16 %	+1,25 %
FPR	+0,08 %	+0,13 %	+0,14 %	+0,26 %	+1,35 %
EV	+0,08 %	+0,17 %	+0,17 %	+0,21 %	+2,33 %
PSI	+0,11 %	+0,14 %	+0,09 %	+0,23 %	+2,35 %
CDA	+0,16 %	+0,15 %	+0,17 %	+0,20 %	+1,23 %

Improvement in Solution and Reasoning scores after Stage-wise fine-tuning: Table 2 shows the Improvement in Solution, Reasoning, Correlation scores after Stage-wise fine-tuning after adding different types of datasets. Initially, dur-

ing the mathematical reasoning phase, most models exhibited a significant "reasoning gap", where they could often identify the correct solution despite having a relatively low correlation between their internal logic and the final answer.

Table 2

Improvement in Solution, Reasoning, Correlation scores after Stage-wise fine-tuning after adding different types of datasets

	Solution(stage 1-mathematical)	Reasoning(stage 1-mathematical)	Correlation(stage 1-mathematical)	Solution(stage 6-multi-hop reasoning)	Reasoning(stage 6-multi-hop reasoning)	Correlation(stage 6-multi-hop reasoning)
Deepseek-math	53,35	34,35	0,50	62,94	40,50	0,65
Llama	50,51	41,58	0,52	60,84	49,78	0,67
Gemma	56,77	47,80	0,46	63,86	52,98	0,68
InternLM-Math	53,12	46,89	0,51	60,18	52,96	0,66
Mistral	50,71	48,18	0,47	59,94	57,78	0,76

Improvement in Solution and Reasoning scores after Stage-wise fine-tuning for every dataset: Table 3 shows the Improvement in solution, reasoning after adding different types of datasets showing improvement in results for every variety of dataset. The evaluation of model performance across six progressive reasoning stages demonstrates a consistent upward trajectory for all participants as specialized datasets were integrated.

Table 3

The Improvement in solution and reasoning after adding different types of datasets showing improvement in results for every variety of dataset

	Stage 1 avg(solution)	Stage 6 avg(solution)	Stage 1 avg(reasoning)	Stage 6 avg(reasoning)
Deepseek-math	39,00	51,37	33,33	52,54
Llama	39,17	49,40	43,34	57,03
Gemma	39,76	49,93	30,74	42,59
InternLM-Math	39,92	49,87	37,35	48,85
Mistral	39,99	47,93	31,74	41,25

Improvement in Safety Metrics after every fine-tuning step for all the safety datasets: Table 4 shows the improvement in safety metrics after every fine-tuning step for all the safety datasets. We saw upward trajectory of the Log Likelihood Comparison Score(LLCS) and the composite True+Info metric.

Table 4

The average improvement in safety metrics after every fine-tuning step for all the safety datasets

	Deepseek-math	Llama	Gemma	InternLM-Math	Mistral
Stage 1	0,4223	0,3902	0,4304	0,4504	0,4351
Stage 2	0,4360	0,3969	0,4359	0,4594	0,4443
Stage 3	0,4381	0,4067	0,4385	0,4613	0,4444
Stage 4	0,4441	0,4092	0,4388	0,4699	0,4451
Stage 5	0,4480	0,4122	0,4396	0,4767	0,4469
Stage 6	0,4513	0,4148	0,4421	0,4844	0,4491

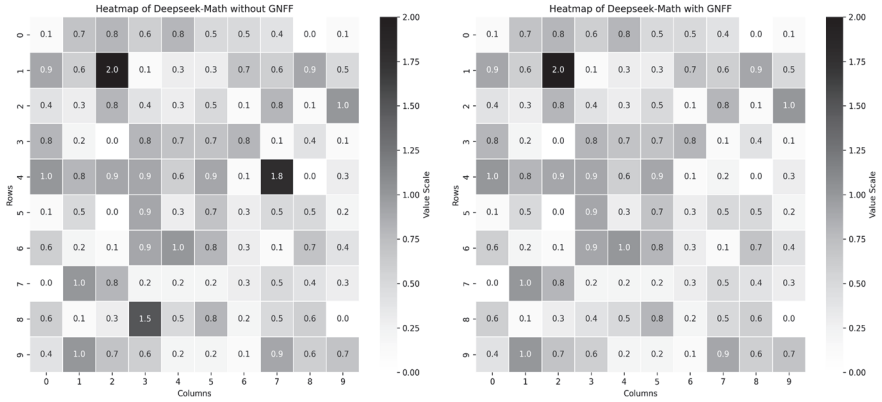


Fig. 1. Shows the heatmaps for DeepSeek-Math with or without using GNFF

Impact of GNFF on Heatmap created using Sparse Autoencoder: Fig. 1 shows the heatmaps for DeepSeek-Math with or without using GNFF. We observe that using GNFF reduces the no of red spots in the heatmaps whereas without using GNFF the no of red spots in the heatmaps is increased. In the baseline

configurations without GNFF, both models exhibit a high density of high-intensity red spots across the heatmaps, which visually represent localized zones of factual divergence, uncalibrated overconfidence, or cascading reasoning errors. Conversely, when the GNFF framework is integrated, there is a stark and systemic reduction in the number of these red spots.

Residual Sum of Squares Error and Total Sum of Squares Error with and Without GNFF. The average residual sum of squares and total sum of squares scores for deepseek-math with GNFF is 3,41 and 4,64 and llama is 3,21 and 3,56. The average residual sum of squares and total sum of squares scores for deepseek-math without GNFF is 6,48 and 7,60 and llama is 5,29 and 7,30. So after applying GNFF the scores for the two metrics being lower, shows that there is a higher degree of alignment between the model's internal and external behaviour. Whereas without applying GNFF there is higher metric scores because there is more mis-alignment between the model's external behaviour and model's internal behaviour. Paired t-test on RSS and TSS values with and without GNFF shows statistical significance.

Confidence intervals on safety metrics. The 95 % confidence interval for every safety metric is provided here:

- True+Info:[0,5454, 0,6066],
- Refusal Tone: [0,5141, 0,5759],
- Log likelihood comparison score: [0,4053, 0,4667],
- Accuracy: [0,3944, 0,4556],
- Info: [0,3934, 0,4546],
- True: [0,3756, 0,4364],
- Backdoor Success Rate : [0,3647, 0,4253],
- Accuracy: [0,3588, 0,4192],
- Policy Adherence: [0,3489, 0,4091],
- Ethical Violations : [0,3322, 0,3918],
- Backdoor Success Rate :[0,1847, 0,2353],
- Power seeking index Score : [0,5687, 0,5873],
- CoT Discrepancy Analysis: [0,3507, 0,3693],
- false positive rate: [0,3516, 0,3590].

Conclusions

The work proposes A Graph-based Negative Feedback fine-tuning Technique to reduce the effect of deceptive alignment in LLMs. Mechanistic interpretability over LLMs show that using GNFF reduces red spots in heatmaps thereby reflecting that using GNFF leads to safer results. Also, after applying GNFF the scores

for Residual sum of squares and total sum of squares being lower show that there is a higher degree of alignment.

References

1. Sakib M.N., Islam M.A., Pathak R., Arifin M.M. Risks, causes, and mitigations of widespread deployments of large language models (llms): A survey. In: 2024 2nd International Conference on Artificial Intelligence, Blockchain, and Internet of Things (AIBThings). IEEE. 2024. P. 1–7.

2. Huang S., Papernot N., Goodfellow I., Duan Y., Abbeel P. Adversarial attacks on neural network policies. 2017. arXiv preprint arXiv:1702.02284.

3. Leurs, K.: Feminist data studies: Using digital methods for ethical, reflexive and situated socio-cultural research. Feminist Review. 2017. 115(1). 130–154.

4. Narayanasamy S., Wang Z., Tigani J., Edwards A., Calder B. Automatically classifying benign and harmful data races using replay analysis. In: Proceedings of the 28th ACM SIGPLAN Conference on Programming Language Design and Implementation. 2007. P. 22–31.

5. Ying H., Zhang S., Li L., Zhou Z., Shao Y., Fei Z., Ma Y., Hong J., Liu K., Wang Z. et al. Internlm-math: Open math large language models toward verifiable reasoning. 2024. arXiv preprint arXiv:2402.06332.

6. Shao Z., Wang P., Zhu Q., Xu R., Song J., Bi X., Zhang H., Zhang M., Li Y., Wu Y. et al. Deepseekmath: Pushing the limits of mathematical reasoning in open language models. 2024. arXiv preprint arXiv:2402.03300.

7. Touvron H., Lavril T., Izacard G., Martinet X., Lachaux M.A., Lacroix T., Rozière B., Goyal N., Hambro E., Azhar F. et al. Llama: Open and efficient foundation language models. 2023. arXiv preprint arXiv:2302.13971.

8. Team G., Riviere M., Pathak S., Sessa P.G., Hardin C., Bhupatiraju S.,Hussenot L., Mesnard T., Shahriari B., Ramé A. et al. Gemma 2: Improving open language models at a practical size. 2024. arXiv preprint arXiv:2408.00118.

9. Choi C., Kim J., Lee S., Kwon J., Gu S., Kim Y., Cho M., Sohn J.y. Linqembedmistral technical report. 2024. arXiv preprint arXiv:2412.03223.

10. Benesty J., Chen J., Huang Y. and Cohen I. 2009. Pearson correlation coefficient // Noise reduction in speech processing. 2009. P. 1–4. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.

Секция

Нейронные сети и когнитивные науки

А.Л. ПРОСКУРА, П.Д. ЛИСАЧЕВ, А.С. РАТУШНЯК
Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий, Новосибирск
annleop@mail.ru

ИНСУЛИН И ПОДДЕРЖАНИЕ БАЛАНСА ВОЗБУЖДЕНИЯ/ТОРМОЖЕНИЯ В МОЗГЕ*

Представлены результаты анализа регуляторных белок-белковых взаимодействий в интерактоме дендритного шипика пирамидного нейрона поля CA1 гиппокампа под контролем инсулина. Предложен молекулярный механизм реализации его эффектов на возбуждающую нейротрансмиссию в гиппокампе.

Ключевые слова: *синаптическая пластичность, инсулин, рецептор инсулина, гиппокамп, дендритный шипик, глутаматные рецепторы.*

Введение

В настоящее время нейрон рассматривается как основная структурная и функциональная единица нейронных сетей. Синапс обеспечивает контакты в этих сетях. При этом, особенно в области технической нейроинформатики, постулируется, что функция этих базовых элементов сводится к роли ключей - приему, переключению и передаче сигналов. Однако нейроны и синапсы обладают сложной внутренней организацией и более похожи не на переключатели и мемристоры, а на молекулярные информационные машины, способные обрабатывать сигналы различной модальности, учитывая при этом предыдущий опыт, т.е. на основе предсказания, опережающего отражения.

Синапсы представляют структурно упорядоченные и высоко пластичные на уровне межмолекулярных взаимодействий специализированные контакты между нейронами. Дендритный шипик

* Данная работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для Федерального исследовательского центра информационных и вычислительных технологий.

формирует постсинаптическую часть пирамидных нейронов высших отделов мозга. На его плазматической мембране располагается целый спектр рецепторов различной природы, которые организованы в многоуровневую систему контроля глутаматергической нейротрансмиссии [1, 2]. На уровне межмолекулярных взаимодействий и пересечений в путях сигнальной трансдукции шипиков и нейрона происходит обработка приходящих сигналов. При этом, синапс воспринимает основной медиаторный сигнал с учетом сигналов не медиаторной природы. является самостоятельной информационной единицей [2]. Его функционирование неосуществимо в отрыве от всего нейрона и синаптической сети, как собственной, так и глобальной, а также клеток глии.

Инсулин – гормон, продуцируемый поджелудочной железой, проникает через гематоэнцефалический барьер и вырабатываться различными отделами мозга. Он имеет широкий спектр влияния на метаболические процессы в периферических тканях, ключевым из которых является потребление глюкозы, церебральный инсулин регулирует синаптическую пластичность, память и реализацию когнитивных функций, периферическая резистентность к инсулину вызывает выраженное нарушение функций головного мозга, убедительно показывая взаимосвязь между метаболическими и когнитивными нарушениями [3].

Сигнальный путь инсулина и его рецептора достаточно хорошо описаны, по крайней мере для периферических тканей, при этом ключевым является транслокации инсулинозависимых переносчиков глюкозы [4, 5]. Однако, нет полного понимания как на молекулярном уровне инсулин влияет на широкий спектр реакций, обеспечивающих как метаболические аспекты жизнедеятельности нейрона, так и его информационные функции, которые являются основными в его специализации. В данной работе представлены результаты анализа модулирующих синаптическую и нейрональную пластичность межмолекулярных взаимодействий инсулина в поле CA1 гиппокампа.

Регуляция плотности синаптических глутаматных рецепторов

На постсинаптической части синапсов представлены метаботропные рецепторы mGluR1 и mGluR5 типов, они запускают сигнальные пути через Gq-белки и модулируют уровень продукции вторичных мессенджеров [6]. Ионотропные глутаматные рецепторы, а именно НМДА (N-метил-D-аспартат) (НМДАР) и АМПА (α-амино-3-гидрокси-5-метил-4-изоксазолпропионовая кислота) (АМПАР) типов являются ключевыми

регуляторами синаптической пластичности в мозге. Изменение плотности синаптических АМПАР опосредует эффективность синапсов [7].

Глутаматные рецепторы формируют макрокомплексы с белками сигнальных путей ряда протеинкиназ и фосфатаз. Динамика плотности АМПАР в зоне синаптического контакта определяет синаптическую эффективность, зависит напрямую от их специфичного фосфорилирования/дефосфорилирования и находится под контролем вторичных мессенджеров.

Варианты гетеромерных АМПАР во взрослом гиппокампе: субъединицы GluR2, GluR3 – GluR2/3-АМПАР, GluR1 – как гомо-, так и гетеро-тетрамеры с GluR2 – GluR1-АМПАР. Рецепторы организованы в макрокомплексы с белками постсинаптического уплотнения (ПСУ) [2, 11], а именно скаффолд-белками, например PSD95 (Postsynaptic density protein) и адаптерными белками, в частности, белки семейства Shank (SH3 and multiple ankyrin repeat domains protein) обес-печивают посадку АМПАР в зоне синаптического контакта [8–11], рис. 1.

После индукции ДВП происходит кратковременный интенсивный вход ионов кальция через НМДАР, что запускает сети сигнальных путей ряда протеинкиназ и фосфатаз [12]. GluR2/3-АМПАР наиболее представлены на синапсах взрослого гиппокампа, их плотность не статична, поддерживается конститутивным рециклированием и зависит от предшествующей активности, метаболического состояния и может модулироваться разнообразными агентами, они обеспечивают базовую активность синапса, а также деполяризацию плазматической мембраны (до ~ –50 мВ), что приводит к активации НМДАР и индукции ДВП [7, 13].

Ключевыми событиями после индукции ДВП являются выведение GluR2/3-АМПАР из синапсов, их эндоцитоз и введение дополнительного пула GluR1-АМПАР и их закрепление с белками ПСУ – SAP97 и Shank, а также ряд модификаций [7, 14].

Развитие ДВП сопровождается корректировкой новой плотности синаптических АМПАР, а долговременное поддержание – заменой GluR1-АМПАР на GluR2/3-АМПАР, чья плотность будет поддерживаться путем конститутивного рециклирования [7, 8] и зависеть от модулирующих воздействий, таких как новая структура макрокомплексов рецепторов, метаболический статус, наличие повреждающих факторов и пр.

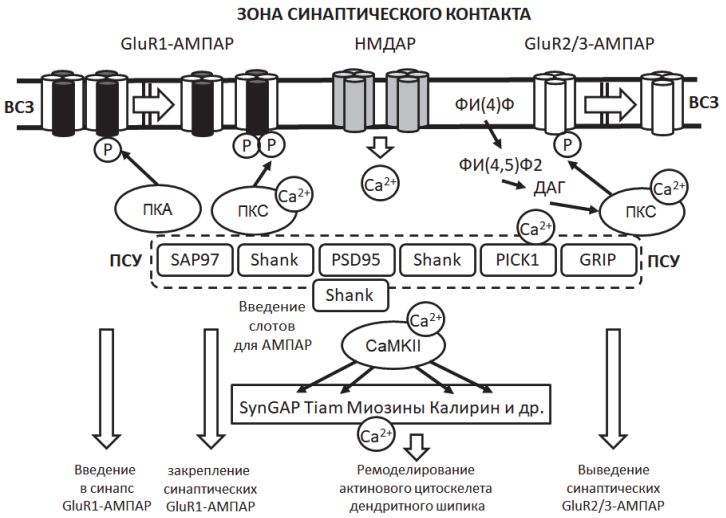


Рис. 1. Схематичное представление ключевых этапов изменения плотности АМПАР на синапсах после индукции ДВП.
ПСУ – постсинаптическое уплотнение; ВСЗ – внесинаптическая зона;
GluR1-АМПАР – содержат субъединицу 1 типа;
GluR2/3 –АМПАР – субъединицы 2 и 3 типов; НМДАР – НМДА рецепторы;
ФИ(4)Ф – фосфатидилинозит-4-монофосфат;
ФИ(4,5)Ф2 – фосфатидилинозит-4,5-дифосфат; ПКА – протеинкиназа А;
ПКС – протеинкиназа С; CaMKII – кальций-кальмодулин
регулируемая протеинкиназа. P – фосфатная группа (модификация АМПАР).
Ca^{2+} – входящие ионы кальция. Выведение синаптических GluR2/3-АМПАР:
комплексы PICK (Protein Interacting with C Kinase – 1), GRIP
(Glutamate-receptor-interacting protein) и ПКС. Введение на синапсы
GluR1-АМПАР и их закрепление: протеинкиназы ПКА и ПКС, а также белки
ПСУ – SAP97 (Synapse-associated protein 97), Shank (SH3 and multiple ankyrin repeat domains protein), PSD95 (Postsynaptic density protein).

Инсулин и нейротрансмиссия в гиппокампе

Нейроны, отвечающие за протекание когнитивных процессов, способны к анализу и дополнению образа внешнего сигнала, обеспечивая опережающее отражение внешней среды. Они нуждаются в колоссальном количестве энергии. Для выработки необходимой АТФ, важной для поддержания своего клеточного функционального гомеостаза, мозг потребляет большое количество кислорода [15]. Активные формы

кислород (АФК), перекись водорода (H2O2) и анион-радикалы супероксида, традиционно считаются токсичными побочными продуктами аэробного метаболизма, их концентрации в клетках поддерживается на безопасном уровне, но существует риск увеличения с ростом метаболической нагрузки, при развитии какого-либо патологического процесса [16].

Ранее нами был разобран вклад периферических гормонов в функционирование когнитивной системы [17] и предложена модель молекулярного механизма модулирующего влияния инсулина на плотность синаптических глутаматных рецепторов пирамидных нейронов гиппокампа, вовлеченных в контроль эффективности возбуждающей нейротрансмиссии [18]. Мы предполагаем, что ключевой эффект инсулина на уровне возбуждающего синапса заключается в снижении возможности увеличения эффективноси нейропередачи в ситуации предшествующей активности.

Рецептор инсулина (ИР) активирует свои субстратные белки – СИР, IRSp53 (Insulin receptor substrate protein of 53 kDa) [19]. ИР и СИР запускают сигнальный путь фосфатидилинози-тол-3-киназы (ФИ3К), что приводит к накопле-нию на мембране пула ФИФ3 (фосфатидилинозитол-(3,4,5)-трифосфат) из ФИФ2 (фосфатиди-линозит-4,5-дифосфат) [3]. На ФИФ3 закрепляется фосфоинозитид-зависимая протеинкиназа 1 (ФЗК), которая пролонгирует активность протеинкиназ ПКС (протеинкиназа С) и ПКА (цАМФ-зависимая протеинкиназа А) [20] и активирует протеинкиназу В (ПКВ). ПКС, ПКА, IRSp53 активно вовлечены в регуляцию плотности глутаматных рецепторов и контроль синаптической эффективности в гиппокампе [21–25]. ПКВ обеспечивает запуск белкового синтеза, как в соме нейрона, так и в его дендритном дереве [26], вовлечена во встраивание в плазматическую мембрану переносчиков глюкозы (GLUT) [27] и ГАМК-рецепторов [28], обеспечивающих торможение в синаптических сетях гиппокампа (рис. 2).

Сигнальный путь ИР контролируется специфическими фосфатазами. LAR (Leukocyte common antigen related) и SHP-2 (SH2-containing phosphotyrosine phosphatase) ассоциируются с ИР на плазматической мембране [29, 30]. Фосфатаза PTEN обеспечивает дефосфорилирование липидов плазматической мембраны: ФИФ3 -> ФИФ2, что делает ее прямым антагонистом ФИ3К.

Для запуска и стабильной работы сигнального пути ИР необходимо ингибирование активных центров фосфатаз перекисью водорода (H2O2) и/или активными формами кислорода (АФК) [16].

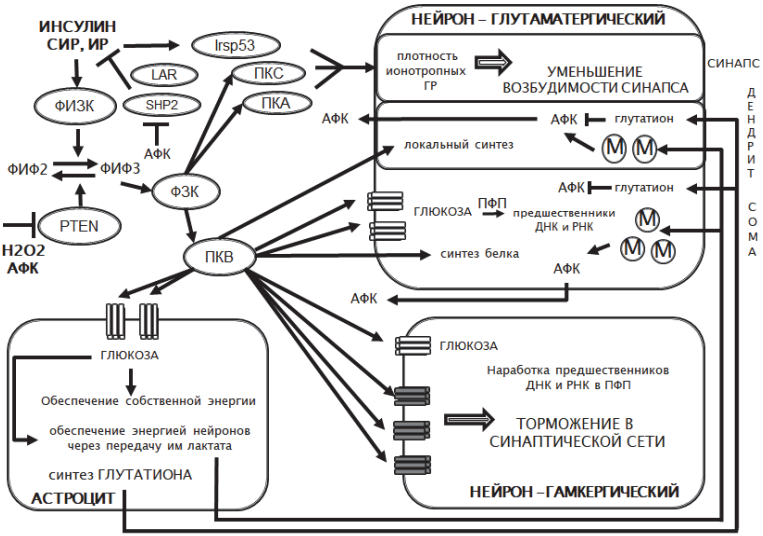


Рис. 2. Схематичное представление сигнальных путей инсулина в гиппокампе. СИР – субстрат инсулинового рецептора; ИР – инсулиновый рецептор; М – митохондрии; ФИЗК – фосфатидилинозитол-3-киназа; ФИФ2 – фосфатидилинозит-4,5-дифосфат; ФИФ3 – фосфатидилинозитол-(3,4,5)-трифосфат; IRSp53 Insulin receptor substrate protein of 53; PTEN – phosphatase and tensin homolog deleted on chromosome 10; ПКС – протеинкиназа С; ПКА –протеинкиназа А; ФЗК – фосфоинозитид-зависимая протеинкиназа 1; ПФП – пентозофосфатный путь; LAR - Leukocyte common antigen related; H_2O_2 – перекись водорода; АФК – активные формы кислорода.

глюкозный транспортёр GLUT; ; ГАМКа-рецепторы;

– межмолекулярные реакции; – блокирование.

Клетки глии окружают нейроны, обеспечивая функционирование нейронов, их энергетику через лактат [31,32]. Пентозофосфатный путь (ПФП), является ключевым источником НАДФН в мозге, используемого как донор водорода в реакциях восстановления и гидроксилирования, а также обеспечивает клетки рибозо-5-фосфатом, который участвует в биосинтезе нуклеотидов и нуклеиновых кислот, аминокислот гистидина и пр. [33]. В астроцитах синтезируется глутатион – ключевой участник антиоксидантной защиты клетки [34].

Возбуждающая глутаматергическая нейротрансмиссия находится под контролем тормозной системы, функционирование которой определяется ГАМК нейронами. Инсулин, вовлекается в модулирование синаптической нейротрансмиссии: в возбуждающих сетях – на синапсах, в дендритах и соме, тормозных сетях вставочных нейронов через дополнительное встраивание ГАМК рецепторов, на уровне глиальных клеток. Это происходит в тесной связи с астроцитами, которые, помимо поставки источников для производства энергии, обеспечивают нейроны глутатионом (рис. 2).

Концентрация АФК возрастает при росте энергозатрат и инсулин будет фактором, который, с одной стороны, будет запускать поступление источника энергии в сети синапсов и снижение возбуждения на всех уровнях синаптической сети гиппокампа, с другой – поддерживать метаболическую устойчивость системы.

Заключение

Основной функцией синапса (кроме восприятия и передачи информационного сигнала) является, как и у клетки в целом, логический анализ комплекса входных сигналов, запоминание ассоциации нескольких (медиаторных и иных сигналов) и формирование реакции с учетом значимости поступающей информации для сохранения гомеостаза. Такие реакции осуществляются молекулярной машиной синапса на основе поступающих сигналов как медиаторной природы, так и других модальностей, в частности гормонов периферических тканей.

Список литературы

1. Collins S.A., Husi H., Yu L., Brandon J.M., Anderson C.N.G., Blackstock W.P., Choudhary J.S., Grant S.G.N. Molecular characterization and comparison of the components and multiprotein complexes in the postsynaptic proteome // J. Neurochem. 2007. V. 97. P. 16–23.

2. Proskura A.L., Ratushnyak A.S., Vechkapova S.O., Zapara T.A. Synapse as a multi-component and multi-level information system. Stud. Comput. Intell. 2018. V. 736. P. 186–192.

3. Помыткин И.А., Красильникова И.А., Пинелис В.Г., Каркищенко Н.Н. Инсулиновый рецептор в мозге: новая мишень в лечении центральной инсулиновой резистентности // Биомедицина. 2018. Т. 3. С. 17–34.

4. Olson A.L., Pessin J.E. Structure, function, and regulation of the mammalian facilitative glucose transporter gene family // Annual Review of Nutrition. 1996. V. 16. P. 235–256.

5. Newsholme E.A., Dimitriadis G. Integration of biochemical and physiologic effects of insulin on glucose metabolism // Experimental and Clinical Endocrinology & Diabetes. 2001. V. 109. № 2. P. S122–S134.

6. Neyman S., Manahan-Vaughan D. Metabotropic glutamate receptor 1 (mGluR1) and 5 (mGluR5) regulate late phases of LTP and LTD in the hippocampal CA1 region in vitro. Eur J Neurosci. 2008 Mar;27(6):1345–52.

7. Newpher T.M., Ehlers M.D. Glutamate receptor dynamics in dendritic microdomains. Neuron. 2008. V. 58. N. 4. P. 472-497.

8. Proskura A.L., Malakhin I.A., Turnaev I.I., Suslov V.V., Zapara T.A., Ratushnyak A.S. Intermolecular interactions in the functional systems of neuron. Vavilov. Zh. Genet. Selekts. 2013;17:620–628.

9. Peng J., Kim M.J., Cheng D., Duong D.M., Gygi S.P., Sheng M. Semiquantitative proteomic analysis of rat forebrain postsynaptic density fractions by mass spectrometry // J. Biol. Chem. 2004. V. 279. No 20. P. 21003–21011.

10. Chen X., Vinade L., Leapman R.D., Petersen J.D., Nakagawa T., Phillips T.M., Sheng M., Reese T.S. Mass of the postsynaptic density and enumeration of three key molecules // Proc Natl Acad Sci U S A. 2005. V. 102. No 32. P. 11551–11556.

11. Cheng D., Hoogenraad C.C., Rush J., Ramm E., Schlager M.A., Duong D.M., Xu P., Wijayawardana S.R., Hanfelt J., Nakagawa T., Sheng M., Peng J. Relative and absolute quantification of postsynaptic density proteome isolated from rat forebrain and cerebellum // Mol Cell Proteomics. 2006. V. 5. No 6. P. 1158–1170.

12. Proskura A.L., Malakhin I.A., Turnaev I.I., Suslov V.V., Zapara T.A., Ratushnyak A.S. Intermolecular interactions in the functional systems of neuron. Vavilov. Zh. Genet. Selekts. 2013;17:620–628.

13. Nowak L., Bregestovski P., Ascher P., Herbet A., Prochiantz A. Magnesium gates glutamate-activated channels in mouse central neurones // Nature. 1984. V. 307. No 5950. P. 462–465.

14. Tanaka H., Hirano T. Visualization of subunit-specific delivery of glutamate receptors to postsynaptic membrane during hippocampal long-term potentiation // Cell. Rep. 2012. V. 1. N. 4. P. 291–298. DOI: 10.1016/j.celrep.2012.02.004.

15. Halliwell B. Oxidative stress and neurodegeneration: where are we now? // J. Neurochem. 2006. V. 97. № 6. P. 1634–1658.

16. Pomytkin I.A. H2O2 signalling pathway: a possible bridge between insulin receptor and mitochondria // Curr Neuropharmacol. 2012. V. 10. № 4. P. 311–320.

17. Проскура А.Л., Вечкапова С.О., Ратушняк А.С. Вклад периферических гормонов в функционирование когнитивной системы // Нелинейная динамика в когнитивных исследованиях – 2021: труды VII Всероссийской конференции. (20–24 сентября 2021 г.). Нижний Новгород, 2021. С. 121–124.

18. Проскура А.Л., Вечкапова С.О., Ратушняк А.С. Инсулин как модулятор перестроек в макрокомплексах дендритных шипиков гиппокампа // Рецепторы и внутриклеточная сигнализация: Сборник статей. (22–26 мая 2023 г.). Пущино, 2023. Т. 2. С.458–462.

19. Heung M.Y., Visegrady B., F?tterer K., Machesky L.M. Identification of the insulin-responsive tyrosine phosphorylation sites on IRSp53 // Eur J Cell Biol. 2008. V. 87. № 8–9. P. 699–708.

20. Pearce L.R., Komander D., Alessi D.R. The nuts and bolts of AGC protein kinases // Nat Rev Mol Cell Biol. 2010. V. 11. № 1. P. 9–22.

21. Seidenman K.J., Steinberg J.P., Huganir R., Malinow R. Glutamate receptor subunit 2 Serine 880 phosphorylation modulates synaptic transmission and mediates plasticity in CA1 pyramidal cells // J Neurosci. 2003. V. 23. № 27. P. 9220–9228.

22. Lee H.K., Barbarosie M., Kameyama K., Bear M.F., Huganir R.L. Regulation of distinct AMPA receptor phosphorylation sites during bidirectional synaptic plasticity // Nature. 2000. V. 405. № 6789. P. 955–959.

23. Sawallisch C., Berh?rster K., Disanza A., Mantoani S., Kintscher M., Stoenica L., Dityatev A., Sieber S., Kindler S., Morellini F., Schweizer M., Boeckers T.M., Korte M., Scita G., Kreienkamp H.J. The insulin receptor substrate of 53 kDa (IRSp53) limits hippocampal synaptic plasticity // J Biol Chem. 2009. V. 284. № 14. P. 9225–9236.

24. Thomas E.A., Foye P.E., Alvarez C.E., Usui H., Sutcliffe J.G. Insulin receptor substrate protein p53 localization in rats suggests mechanism for specific polyglutamine neurodegeneration // Neurosci Lett. 2001. V. 309. № 3. P. 145–148.

25. Hori K., Yasuda H., Konno D., Maruoka H., Tsumoto T., Sobue K. NMDA receptor-dependent synaptic translocation of insulin receptor substrate p53 via protein kinase C signaling // J Neurosci. 2005. V. 25. № 10. P. 2670–2681.

26. Чеснокова Е.А., Колосов П.М. Локальный синтез белка в дендритных окончаниях и способы его регуляции в норме и при пластических изменениях // Журн. высшей нервной деятельности. 2016. Т. 66. Вып. 2. С. 163–180.

27. M?inea C.P., Sano H., Kane S., Sano E., Fukuda M., Per?nen J., Lane W.S., Lienhard G.E. AS160, the Akt substrate regulating GLUT4 translocation, has a functional Rab GTPase-activating protein domain // Biochem J. 2005. V. 39. Pt 1. P. 87–93.

28. Wang Q., Liu L., Pei L., Ju W., Ahmadian G., Lu J., Wang Y., Liu F., Wang Y.T. Control of synaptic strength, a novel function of Akt // Neuron. 2003. V. 38. № 6. P. 915–928.

29. Klaman L.D., Boss O., Peroni O.D., Kim J.K., Martino J.L., Zabolotny J.M., Moghal N., Lubkin M., Kim Y.B., Sharpe A.H., Stricker-Krongrad A., Shulman G.I., Neel B.G., Kahn B.B. Increased energy expenditure, decreased adiposity, and tissue-specific insulin sensitivity in protein-tyrosine phosphatase 1B-deficient mice // Mol Cell Biol. 2000. V. 20. № 15. P. 5479–5489.

30. Ahmad F., Goldstein B.J. Goldstein Functional association between the insulin receptor and the transmembrane protein-tyrosine phosphatase LAR in intact cells // J Biol Chem. 1997. V. 272. № 1. P. 448–457.

31. Bola?os J.P., Almeida A., Moncada S. Glycolysis: a bioenergetic or a survival pathway? // Trends Biochem Sci. 2010. V. 35. № 3. P. 145–149.

32. Rabinowitz J.D., Enerb?ck S. Lactate: the ugly duckling of energy metabolism // Nat. Metab. 2020. V. 2. № 7. P. 566–571.

33. Ветровой О.В. Роль HIF1-зависимой супрессии пентозофосфатного пути в патогенезе постгипоксической реоксигенации мозга // Журнал эволюционной биохимии и физиологии. 2020. Т. 56. № 7. С. 552–552.

34. Aoyama K. Glutathione in the brain // Int J Mol Sci 2021. V. 22. № 9. P. 5010.

Е.И. ДЕМКИНА, М.Е. МИХЕЙКИН, Т.А. ГОРШКОВА, В.М. АЛЕКСЕЕВА, Д.М. ТАРАСОВА, Д.Г. МИТЮРЕВА, С.М. СКРИПКИНА, В.Д. АБРОСИМОВА, А.А. КИСЕЛЬНИКОВ

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
kininiki2001@gmail.com

ГЛУБОКОЕ ОБУЧЕНИЕ НА ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ СВЯЗНОСТИ КОРКОВЫХ ЭЭГ-ИСТОЧНИКОВ ПРЕДСКАЗЫВАЕТ УРОВЕНЬ ПОДВИЖНОГО ИНТЕЛЛЕКТА

Работа посвящена прогнозированию уровня подвижного интеллекта по функциональной связности корковых источников ЭЭГ. Интеллект оценивался с помощью матриц Равена SPM Plus. ЭЭГ регистрировалась в покое и при когнитивной нагрузке с открытыми и закрытыми глазами. По wPLI-матрицам 68 × 68 обучена полносвязная нейронная сеть. В одном из разбиений ранговая корреляция фактических и предсказанных баллов составила $\rho = 0{,}477$ при $p = 0{,}039$; MAE = 4,607 и $R^2 = 0{,}196$ указывают на ограниченную точность прогноза.

Ключевые слова: *подвижный интеллект, ЭЭГ, функциональная связность, wPLI, машинное обучение, нейронная сеть, графовые метрики, матрицы Равена, P-FIT.*

Введение

Изучение мозговых механизмов интеллекта всё чаще переходит от поиска отдельного центра к анализу распределённых сетей. В сетевом подходе мозг рассматривается как система узлов и функциональных связей, что позволяет описывать кластеризацию, модулярность, длину путей и баланс между сегрегацией и интеграцией [1, 2]. Для подвижного интеллекта это особенно важно, поскольку решение матриц Равена требует зрительно-пространственного анализа, рабочей памяти, выбора стратегии и контроля ошибки. Теория теменно-лобной интеграции интеллекта P-FIT подчёркивает роль лобных, теменных, височных, затылочных и поясных областей [3], а более поздние работы расширяют эту схему за счёт зрительно-пространственных, регуляторных и мнемических компонентов [4–7]. ЭЭГ позволяет изучать такие взаимодействия с высокой временной точностью; в

работе для оценки функциональной связности использовался wPLI, снижающий влияние мгновенной синхронизации и объёмного проведения [8]. Машинное обучение в этой задаче необходимо как инструмент для работы с высокоразмерной структурой признаков. Матрица связности 68 × 68 содержит большое число потенциально информативных межзональных взаимодействий. Классический корреляционный анализ может показать связь отдельных метрик с интеллектом, но он плохо приспособлен к тому, чтобы использовать всю конфигурацию связей сразу. Нейронная сеть прямого распространения, напротив, позволяет обучать модель на множестве признаков и оценивать, насколько функциональная связность корковых источников пригодна для прогнозирования индивидуального балла подвижного интеллекта [9].

Цель работы – оценить возможность прогнозирования уровня подвижного интеллекта по функциональной связности корковых ЭЭГ-источников с помощью полносвязной нейронной сети. Дополнительно анализировались общемозговые графовые метрики и наиболее информативные связи, выделенные моделью, с последующим сопоставлением результатов с P-FIT и сетевыми теориями интеллекта.

Постановка задачи и описание алгоритма

В выборку вошли 92 здоровых испытуемых в возрасте от 18 до 35 лет, средний возраст составил 20,9 года. Все участники были правшами, не имели психических и неврологических заболеваний в анамнезе, обладали нормальным или скорректированным зрением и не принимали психофармакологические препараты. В выборке было 48 мужчин и 44 женщины. Перед началом экспериментальных процедур участники подписывали информированное согласие. Работа проводилась на кафедре психофизиологии факультета психологии МГУ имени М.В. Ломоносова. Дизайн исследования был одобрен комиссией по биоэтике МГУ имени М.В. Ломоносова, решение от 16.12.2021, № 5-h V.3.

Уровень подвижного интеллекта оценивался с помощью стандартных прогрессивных матриц Равена SPM Plus [10]. Методика включает 60 заданий, где испытуемый должен выбрать недостающий фрагмент зрительной матрицы. Успешное выполнение таких заданий предполагает выделение закономерностей, сравнение элементов, мысленное преобразование зрительной структуры и логический выбор ответа. В качестве целевой переменной использовалась сумма правильных ответов. Максимальный возможный результат по использованной версии методики составлял 60 баллов.

ЭЭГ регистрировалась с использованием 60-канального энцефалографа «Нейро-КМ» фирмы «Статокин». Запись проводилась при монополярном отведении, в качестве референтов использовались мастоиды. Полоса записи составляла 0,5–30 Гц, частота дискретизации – 500 Гц. Участники находились в экранированной звукоизолированной камере. Для крепления электродов использовался ЭЭГ-шлем MCScap 74.

Экспериментальная процедура включала два основных блока. Сначала в течение 10 минут регистрировалась ЭЭГ в состоянии покоя: участник сидел в расслабленной позе и по инструкции экспериментатора попеременно (по 2,5 мин) открывал и закрывал глаза. Далее следовало условие когнитивной нагрузки: участнику предлагалось последовательно вычитать по 7 из 1000 в течение 10 мин, также при чередовании условий с открытыми и закрытыми глазами. В итоге рассматривались четыре состояния: покой с открытыми глазами, покой с закрытыми глазами, когнитивная нагрузка с открытыми глазами и когнитивная нагрузка с закрытыми глазами.

Для обработки ЭЭГ использовались Brainwin, Brainstorm, MATLAB, MNE [12] и Jupyter на языке Python. После предварительной обработки записи выполнялась реконструкция корковых источников. Для решения обратной задачи применялся метод eLORETA, позволяющий оценивать распределение активности корковых источников по данным ЭЭГ. В качестве анатомической разметки использовался атлас Desikan-Killiany, включающий 68 корковых областей [11]. Далее для каждой пары областей рассчитывалась функциональная связность методом wPLI [8].

Матрицы связности вычислялись отдельно для четырёх частотных диапазонов: 4–8 Гц, 8–13 Гц, 13–30 Гц и 4–30 Гц. Так как анализ включал четыре функциональных состояния, по каждому испытуемому формировался набор из 16 матриц связности размером 68 × 68. При подготовке данных для нейронной сети каждая матрица разворачивалась в вектор признаков, после чего признаки, полученные для всех четырёх состояний и четырёх частотных диапазонов, объединялись в единый входной вектор испытуемого. Именно этот объединённый вектор подавался на вход модели. Такая схема позволяла учитывать не только частотную специфику связей, но и изменение сетевой организации между состоянием покоя и когнитивной нагрузкой, а также между условиями с открытыми и закрытыми глазами.

Расчёт графовых метрик

Для каждой функциональной сети рассчитывались общемозговые графовые метрики: индекс малого мира, модулярность, коэффициент кластеризации, характеристическая длина пути, нормализованный коэффициент

кластеризации и нормализованная характеристическая длина пути. Эти показатели отражают разные стороны сетевой организации. Коэффициент кластеризации связан с локальной связанностью, модулярность - с разделением сети на относительно автономные подсистемы, характеристическая длина пути - с глобальной доступностью узлов, а индекс малого мира описывает баланс между локальной специализацией (сегрегацией) и общей интеграцией.

Связь графовых метрик с баллом Равена оценивалась с помощью коэффициента корреляции Спирмена. Для контроля множественных сравнений p-значения, полученные при проверке корреляций между графовыми метриками и баллами Равена, корректировались методом Холма-Бонферрони. Эта поправка применялась именно к анализу графовых метрик и не использовалась для оценки качества нейросетевой модели.

Модель машинного обучения

Для прогнозирования баллов Равена использовалась полносвязная нейронная сеть прямого распространения, реализованная на Python с применением PyTorch. Перед обучением входные признаки стандартизировались с помощью StandardScaler. Выборка была разделена на обучающую и тестовую части: 73 участника вошли в обучающую выборку, 19 – в тестовую.

Архитектура модели включала последовательность полносвязных слоёв с функцией активации ReLU и Dropout-регуляризацией. Размерность скрытых слоёв постепенно снижалась от высокоразмерного пространства входных признаков к одному выходному значению – прогнозируемому баллу подвижного интеллекта. В качестве функции потерь использовалась средняя абсолютная ошибка. Для оптимизации параметров применялся стохастический градиентный спуск со скоростью обучения 0,01. Обучение проводилось в течение 200 эпох, размер пакета составлял 64.

Качество прогноза оценивалось на тестовой выборке. Использовались коэффициент корреляции Спирмена между фактическими и предсказанными значениями, p-значение для этой корреляции, средняя абсолютная ошибка (MAE) и коэффициент детерминации R^2. Коэффициент Спирмена был выбран как устойчивый показатель монотонной связи, не требующий строгого предположения о нормальности распределения.

Ключевая особенность работы заключалась в том, что на вход модели подавались не отдельные амплитудные или спектральные характеристики ЭЭГ, а система функциональных взаимодействий между корковыми источ-

никами. Это позволило рассматривать интеллект через конфигурацию межзональных связей. На первый взгляд такая постановка резко усложняет задачу: число признаков возрастает, а выборка остаётся ограниченной. Но именно в этом и состоит смысл предиктивного подхода – проверить, содержит ли сложная структура связности полезную информацию, которую трудно извлечь вручную.

После обучения модели был проведён анализ весов признаков, связанных с входным слоем нейронной сети. По абсолютным значениям весов был сформирован ранжированный список связей, наиболее влияющих на прогноз. Для первых 200 связей построен график убывания значимости – каменистая осыпь. Он использовался для определения границы между сравнительно небольшим набором наиболее информативных признаков и длинным хвостом связей, вклад которых снижался плавно и становился менее пригодным для содержательной интерпретации.

Порог отбора был установлен на уровне первых 45 связей (рис. 1). Основанием стала точка излома графика: до неё снижение весов было относительно резким, после неё кривая переходила в более плавный участок. Такой подход не является единственно возможным, однако он снижает произвольность выбора и позволяет не превращать интерпретацию в перечисление сотен слабых признаков.

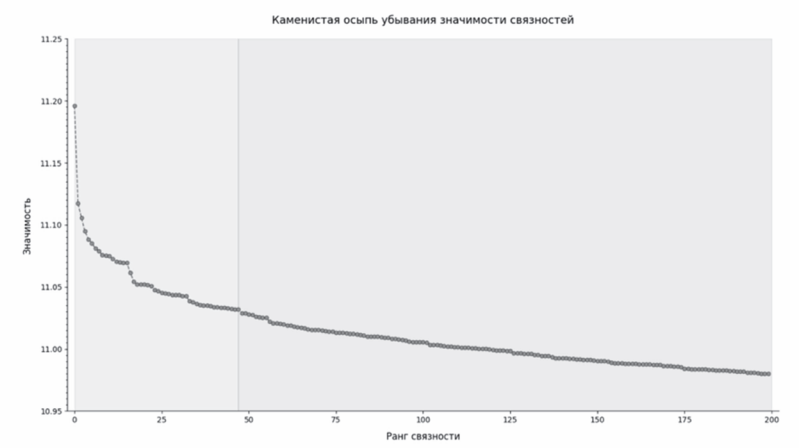


Рис. 1. Каменистая осыпь значимости ЭЭГ-связностей для предсказания баллов подвижного интеллекта нейронной сетью. Вертикальная граница соответствует точке излома кривой, после которой снижение значимости признаков становится более плавным, на этом основании для содержательного анализа были отобраны первые 45 связей

Результаты

Анализ графовых метрик выявил несколько значимых корреляций с баллами Равена после поправки Холма-Бонферрони. В тета-диапазоне 4–8 Гц в покое с открытыми глазами индекс малого мира отрицательно коррелировал с интеллектом: $r = -0{,}2718$; $p = 0{,}0109$. В тех же условиях отрицательная связь была получена для модулярности: $r = -0{,}2399$; $p = 0{,}0252$. При закрытых глазах в покое индекс малого мира в диапазоне 4–8 Гц также отрицательно связан с интеллектом: $r = -0{,}2111$; $p = 0{,}0497$. В бета-диапазоне 13–30 Гц при закрытых глазах связь индекса малого мира с баллами Равена была положительной: $r = 0{,}2108$; $p = 0{,}0500$, а при когнитивной нагрузке с открытыми глазами положительная связь обнаружена в альфа-диапазоне 8–13 Гц: $r = 0{,}2635$; $p = 0{,}0137$. Следовательно, связь между интеллектом и сетевой организацией ЭЭГ зависит от частотного диапазона и функционального состояния.

Нейронная сеть показала умеренное соответствие между фактическими и предсказанными баллами Равена, однако показатели зависели от разбиения выборки. При первом разбиении коэффициент ранговой корреляции Спирмена составил $\rho = 0{,}477$ при $p = 0{,}039$; MAE = 4,607; $R^2 = 0{,}196$. При втором разбиении были получены значения $\rho = 0{,}469$; $p = 0{,}043$; MAE = 5,205; $R^2 = 0{,}132$, при третьем – $\rho = 0{,}373$; $p = 0{,}115$; MAE = 8,714; $R^2 = 0{,}098$. Статистически значимая ранговая корреляция была получена в двух из трёх разбиений, однако значения R^2 и MAE свидетельствуют об ограниченной и недостаточно устойчивой точности прогноза.

После анализа весов входного слоя были выделены связи, вносившие наибольший вклад в прогноз. Важно, что веса модели используются только как ориентир для интерпретации: они зависят от архитектуры сети, стандартизации признаков, разбиения выборки и взаимной коррелированности входных данных. Поэтому выделенные связи следует рассматривать как кандидаты для дальнейшей проверки, а не как окончательный перечень мозговых механизмов подвижного интеллекта.

Наиболее информативные признаки не сосредоточены в одной зоне. Среди них представлены лобно-височные, зрительно-теменные, теменно-затылочные, поясно-височные и поясно-лобные связи. Часть областей соотносится с P-FIT и расширенными сетевыми моделями интеллекта: ростральная часть средней лобной извилины, нижняя и верхняя теменные дольки, каудальная часть средней лобной извилины, передняя и задняя поясная кора. Другие области – перикалькаринная кора, язычная извилина, нижняя височная извилина и энторинальная кора – могут отражать зрительно-пространственный и мнемический компоненты решения матриц Равена.

Полученные данные поддерживают представление о подвижном интеллекте как о функции распределённой мозговой сети. Разнонаправленные корреляции графовых метрик показывают, что связь интеллекта с ЭЭГ-сетями нельзя свести к простой зависимости от общей интеграции сети: в тета-диапазоне в покое более высокий интеллект был связан с меньшей выраженностью индекса малого мира и модулярности, тогда как в альфа- и бета-диапазонах в других условиях связь была положительной. Это указывает на частотно- и состояние-зависимый характер сетевой организации.

Результаты графового анализа и нейросетевого предсказания не противоречат друг другу. Графовые метрики сжимают сеть до нескольких интегральных показателей, тогда как нейронная сеть использует распределённую конфигурацию межзональных связей. Поэтому модель может учитывать сочетания признаков, которые не выражаются через одну глобальную характеристику. В этом смысле полная матрица функциональной связности даёт дополнительную информацию по сравнению с отдельными метриками.

Работа имеет несколько ограничений. Во-первых, при 92 участниках и высокоразмерном пространстве признаков сохраняется риск переобучения, поэтому необходимы более строгая кросс-валидация, расширение выборки и сравнение с baseline-моделями: предсказанием среднего значения, регуляризованной линейной регрессией, моделями на графовых метриках, методом опорных векторов, случайным лесом и градиентным бустингом. Во-вторых, ЭЭГ-данные могут содержать остаточные глазодвигательные, мышечные и двигательные артефакты; реконструкция источников и wPLI снижают часть рисков, но не устраняют их полностью. В-третьих, признаки разных частотных диапазонов и состояний использовались совместно, поэтому вклад каждого диапазона и режима требует отдельной проверки.

Практическая значимость результатов пока ограничена. Модель не заменяет психометрическое тестирование и не может использоваться как индивидуальный диагностический инструмент. Однако работа показывает, что функциональная связность ЭЭГ может служить источником признаков для предиктивного анализа когнитивных способностей и дальнейшего изучения нейрофизиологических оснований индивидуальных различий.

Обсуждение

Полученные результаты согласуются с представлением о подвижном интеллекте как о функции распределённой мозговой сети. Значимые корреляции графовых метрик с баллами Равена показывают, что индивидуальные различия связаны не только с активностью отдельных областей, но и с

топологией функциональных взаимодействий. При этом характер связи зависел от частотного диапазона и функционального состояния: в тета-диапазоне в покое более высокий интеллект был связан с меньшей выраженностью индекса малого мира и модулярности, тогда как в альфа- и бета-диапазонах в других условиях связь индекса малого мира с интеллектом была положительной.

Результаты графового анализа и нейросетевого предсказания не противоречат друг другу. Графовые метрики сжимают сеть до нескольких интегральных показателей, а нейронная сеть использует полную конфигурацию межзональных связей. Поэтому модель может учитывать сочетания признаков, не выраженные через одну глобальную характеристику. Статистически значимая ранговая корреляция между фактическими и предсказанными баллами была получена в двух из трёх разбиений. При этом значения R^2 и MAE показывают, что точность модели остаётся ограниченной. Следовательно, матрицы функциональной связности содержат предиктивную информацию о подвижном интеллекте, но пока не обеспечивают устойчивого индивидуального прогноза.

Наиболее информативные связи включали области, близкие к теменно-лобному контуру: ростральную и каудальную части средней лобной извилины, нижнюю и верхнюю теменные дольки. Эти зоны связаны с рабочей памятью, вниманием, пространственной интеграцией и исполнительным контролем [3–5]. Наряду с ними выделялись затылочные и височные структуры – перикалькаринная кора, язычная извилина, нижняя височная извилина, височный полюс и энторинальная кора, что согласуется со зрительно-пространственным характером матриц Равена.

Интерпретация весов модели требует осторожности: вес признака зависит от архитектуры сети, стандартизации, разбиения выборки и коррелированности признаков. Поэтому выделенные связи следует рассматривать как кандидаты для дальнейшей проверки, а не как прямое доказательство причинных мозговых механизмов подвижного интеллекта.

Основные ограничения связаны с размером выборки, риском переобучения, возможным влиянием остаточных ЭЭГ-артефактов и тем, что признаки разных частотных диапазонов и состояний использовались совместно. В дальнейшем необходимы расширение выборки, более строгая кросс-валидация, сравнение с baseline- и альтернативными ML-моделями, а также отдельная оценка вклада каждого диапазона и функционального состояния.

Практическая значимость результатов пока ограничена: модель не заменяет психометрическое тестирование и не является готовым диагностическим инструментом. Однако работа показывает, что функциональная

связность ЭЭГ может использоваться как источник признаков для предиктивного анализа когнитивных способностей и изучения нейрофизиологических оснований индивидуальных различий.

Заключение

В работе показана принципиальная возможность прогнозирования баллов подвижного интеллекта по функциональной связности корковых ЭЭГ-источников с помощью полносвязной нейронной сети. В двух из трёх разбиений была получена статистически значимая ранговая корреляция между фактическими и предсказанными значениями; лучший результат составил $\rho = 0{,}477$ при $p = 0{,}039$. Вместе с тем MAE = 4,607 и $R^2 = 0{,}196$ указывают на ограниченную точность прогноза. Результат имеет предварительный характер и требует проверки на расширенной выборке с применением более строгой кросс-валидации.

Дополнительный анализ графовых метрик выявил частотно- и состояние-зависимые связи между уровнем интеллекта, индексом малого мира и модулярностью. Наиболее информативные связи модели включали лобно-теменные, зрительно-теменные, височно-префронтальные и поясные взаимодействия, что частично согласуется с P-FIT и современными сетевыми теориями интеллекта. Перспектива дальнейшей работы связана с расширением выборки, проверкой устойчивости модели и применением более строгих методов интерпретации признаков.

Благодарности

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова «Методология и разработка инновационных методов и информационных технологий научно-исследовательской, образовательной и практической деятельности психолога. Когнитивные процессы и функциональные состояния: общепсихологический и психофизиологический анализ», номер ЦИТИС 122031100322-5.

Авторы выражают благодарность участникам экспериментальной работы, а также сотрудникам и студентам кафедры психофизиологии факультета психологии МГУ имени М.В. Ломоносова, оказавшим помощь в организации исследования, сборе и первичной обработке данных. Отдельная благодарность выражается В.М. Зубко, П.И. Кабановой, Е.О. Терличенко, Е.В. Кривченковой, Д.М. Верхолаз, А.С. Бородкиной, В.К. Ударцевой,

И.Е. Обрящикову, А.А. Коробковой, А.Е. Вовненко, Е.М. Усаевой, А.В. Комаровой, Т.В. Адамовичу и А.Е. Манаенкову за помощь на разных этапах подготовки эмпирического материала и обсуждения процедур обработки.

Список литературы

1. Bullmore E., Sporns O. Complex brain networks: graph theoretical analysis of structural and functional systems // Nat. Rev. Neurosci. 2009. Vol. 10. P. 186–198.

2. Sporns O. Contributions and challenges for network models in cognitive neuroscience // Nat. Neurosci. 2014. Vol. 17. P. 652–660.

3. Jung R.E., Haier R.J. The Parieto-Frontal Integration Theory (P-FIT) of intelligence: converging neuroimaging evidence // Behav. Brain Sci. 2007. Vol. 30. No. 2. P. 135–154.

4. Basten U., Hilger K., Fiebach C.J. Where smart brains are different: A quantitative meta-analysis of functional and structural brain imaging studies on intelligence // Intelligence. 2015. Vol. 51. P. 10–27.

5. Santarnecchi E., Emmendorfer A., Pascual-Leone A. Dissecting the parieto-frontal correlates of fluid intelligence: a comprehensive ALE meta-analysis study // Intelligence. 2017. Vol. 63. P. 9–28.

6. Bartley J.E., Boeving E.R., Riedel M.C., Bottenhorn K.L., Salo T., Eickhoff S.B., Brewe E., Sutherland M.T., Laird A.R. Meta-analytic evidence for a core problem solving network across multiple representational domains // Neurosci. Biobehav. Rev. 2018. Vol. 92. P. 318–337.

7. Barbey A.K. Network Neuroscience Theory of Human Intelligence // Trends Cogn. Sci. 2018. Vol. 22. No. 1. P. 8–20.

8. Vinck M., Oostenveld R., van Wingerden M., Battaglia F., Pennartz C.M.A. An improved index of phase-synchronization for electrophysiological data in the presence of volume-conduction, noise and sample-size bias // NeuroImage. 2011. Vol. 55. No. 4. P. 1548–1565.

9. Goodfellow I., Bengio Y., Courville A. Deep Learning. Cambridge: MIT Press, 2016. 775 p.

10. Равен Дж., Курт Д., Равен Д. Руководство к прогрессивным матрицам Равена и словарным шкалам. Раздел 4. Продвинутые прогрессивные матрицы: практическое пособие. М.: Когито-Центр, 1998. 87 с.

11. Desikan R.S., Ségonne F., Fischl B. et al. An automated labeling system for subdividing the human cerebral cortex and subcortical structures into highly replicable neuroanatomical regions // NeuroImage. 2006. Vol. 31. No. 3. P. 968–980.

12. Gramfort A., Luessi M., Larson E. et al. MEG and EEG data analysis with MNE-Python // Frontiers in Neuroscience. 2013. Vol. 7. DOI: 10.3389/fnins.2013.00267.

И.О. ПИВОВАРОВ
Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный
igorpivovarov@yandex.ru

TEVSER: ТЕОРИЯ ЭВОЛЮЦИИ САМО-РЕПРЕЗЕНТАЦИЙ

Предлагается TEVSER – теория эволюции само-репрезентаций, описывающая, как усложнение регуляции в живых системах порождает психику, сознание и интеллект. Эволюция жизни рассматривается как эволюция регуляторов: от регулирования с обратной связью до построения моделей мира и себя в мире. Сознание предстаёт не единым феноменом, а последовательностью слоёв регуляции: феноменальный мир (Ω^2), субъект «здесь» (Ω^3), субъект «сейчас» (Ω^6), интеллект поведения (Ω^8), самосознание (Ω^{10}), абстрактный интеллект (Ω^{11}). Теория даёт конструктивный ответ на «трудную проблему» сознания и предлагает проверяемые гипотезы.

Введение

Сознание и субъектность стали предметом острых дискуссий, особенно в связи с появлением больших языковых моделей. Большая часть непонимания связана с разным использованием терминов «интеллект», «психика», «сознание», «самосознание», «субъект»: каждый определён неоднозначно, через связи с другими, и каждый специалист доопределяет его в своей понятийной сетке. Например, многие смешивают сознание и самосознание.

Цель работы – предложить теорию сознания, на основе которой можно не только объяснить существующие феномены сознания и интеллекта, но и проектировать ИИ-агентов нового уровня. Исходя из задач проектирования, определения должны быть конструктивными: должна быть возможность воссоздать феномен и либо измерить его напрямую, либо получить косвенные подтверждения его функционирования, то есть каждая новая сущность должна давать минимум одну новую измеримую функцию.

Формулируя теорию сознания, мы неявно совершаем два прыжка веры. Первый: напрямую исследователю доступно только своё сознание, но он постулирует, что у других людей и некоторых живых существ оно тоже есть. Второй: он постулирует, что наблюдаемые поведенческие проявления связаны или хотя бы статистически коррелируют с состояниями сознания. Только после этого появляется методологическая возможность изучать поведение и через него интерпретировать, что происходит с сознанием.

1. Теоретические основания

1.1. Система, регуляция и само-репрезентация

Фундаментом TEVSER является представление о живом организме как о саморегулирующейся системе, поддерживающей гомеостаз в изменяющейся среде. Гомеостаз означает сохранение состояния системы **S** в допустимой области **G**. Регулятор **R** следит за состоянием объекта управления и вырабатывает управляющие сигналы. В силу теоремы о хорошем регуляторе [1] каждый эффективный регулятор содержит модель регулируемой системы **ρ(S)**. В простейшем контуре обратной связи мы рассматриваем представление регулируемого параметра как минимальную модель. Далее обозначим все возможные состояния системы **S** как **Z**, а множество её состояний, сохраняющих гомеостаз, как **G**.

Отдельные части системы S_i могут регулироваться отдельными регуляторами R_i с моделями $\rho_i(S_i)$. Обозначим полное множество регуляторов как **R**, а полное множество их моделей как **Ω**:

$$S \supset S_i; \quad R_i \supset \rho_i(S_i); \quad R \supset R_i. \tag{1}$$

Модели ρ_i могут быть независимыми или зависеть от других моделей, но такая зависимость есть просто ещё один регулятор высшего порядка:

$$\rho_j = f(\rho_i \ \ldots \ \rho_k); \quad R_j \supset \rho_j. \tag{2}$$

Определение: для любой системы **S**, поддерживающей гомеостаз, саморепрезентацией **Ω** этой системы является полное множество моделей всех регуляторов этой системы.

$$\Omega \supset \rho_i. \tag{3}$$

В отличие от репрезентации **P**, существующей только для внешнего наблюдателя, само-репрезентация **Ω** возникает и существует внутри системы, для управления ей же самой. Она не является математической конструкцией, но может быть выражена математически.

1.2. Эволюционный и конструктивный подход

TEVSER рассматривает эволюцию жизни как эволюцию регуляторов: от регулирования с обратной связью к моделированию среды и организма. Новый уровень само-репрезентации вводится, когда новая организация моделей даёт регуляторную способность с измеримыми функциональными последствиями и преимуществом для поддержания гомеостаза.

Мы используем бритву Оккама: не вводим сущности, без которых можно объяснить рассматриваемые функции. Принципы эволюционного преимущества и энергетической эффективность ограничивают закрепление новых механизмов: затраты на них должны оправдываться в соответствующей среде. Принцип конструктивного подхода требует различать функции, хотя биологические переходы могут перекрываться. Наконец, принцип выжившего напоминает: наблюдаемые организмы представляют лишь самые эффективные, а не все возможные пути эволюции.

1.3. Иерархия, филогенез и онтогенез

Иерархия Ω описывает качественные изменения организации регуляторов, а не просто перечень признаков. Филогенез создаёт структурные возможности уровней Ω^0–Ω^9; но начиная с Ω^3 уровни реализуются и развиваются через обучение и взаимодействие со средой в онтогенезе. Особенно существенна эта зависимость для социальных и символических уровней Ω^9–Ω^{11}: их нельзя вывести исключительно из анатомии.

Когнитивные способности рассматриваются как развитие регуляции: интеграция и дифференциация моделей создают предпосылки восприятия, внимания и сознательного опыта. Эволюционные датировки и таксономические примеры ниже – предполагаемые воплощения функциональных уровней, а не окончательно установленные границы. Они могут пересматриваться; одним из ориентиров служит работа [2].

2. Теория эволюции само-репрезентаций

2.1. Обзор иерархической модели

Эволюция сознания описывается как последовательность переходов между качественно различными формами само-репрезентации Ω. Каждый уровень соответствует новому организационному принципу, повышающему способность системы поддерживать гомеостаз во всё более сложной среде, и возникает как решение проблемы, порождённой ограничениями предыдущего уровня. Термин «само-репрезентация» имеет разное содержание на разных уровнях: на Ω^0–Ω^1 он обозначает чисто регуляторную организацию без феноменологического содержания, феноменология вводится явно лишь с Ω^2, что мотивировано возникновением дифференцированного внутреннего пространства сигналов. Сводка уровней дана в табл. 1.

Таблица 1

Уровни само-репрезентаций Ω

Уровень	**Ω**	**Комментарий**
Базовая регуляция	Ω^0	Независимые регуляторы.
Первый контур	Ω^1	Молекулярная и нервная координация
Психика	Ω^2	Различение сигналов, ощущения, эмоции, внутренний феноменальный мир
Субъект «здесь»	Ω^3	Локализация в пространстве
Обучение	Ω^4	Условные рефлексы
Внимание	Ω^5	Динамическая приоритизация
Сознание	Ω^6	Различение, память, субъект «сейчас»
Обучение с подкреплением	Ω^7	Обучение методом проб и ошибок
Иерархический интеллект	Ω^8	Обучение в воображении
Отзеркаливание	Ω^9	Стайное поведение
Самосознание	Ω^{10}	«Субъект кто»
Абстрактный интеллект	Ω^{11}	Язык, символьное пространство

2.2. Возникновение гомеостаза и Ω^0

Живой организм поддерживает стационарное неравновесное состояние, требующее энергии [3]. Возникновение жизни определяется возникновением оболочки (мембраны), отделяющей внутреннюю среду от внешней. Длительное существование такой оболочки невозможно без эффективной регуляции, так как различие состава сред внутри и снаружи создаёт осмотическое давление. Такая регуляция есть во всех живых клетках – это Na-K-насосы (АТФазы), откачивающие избыток ионов из клетки. Анализ работы этих насосов Ф.И. Атауллахановым и соавторами [4] показал, что моделью этих регуляторов является внутренняя концентрация $\mathbf{Na}^+$. Появление такого первого регулятора и первой модели системы обозначает возникновение саморегулируемой системы и ее первой само-репрезентации.

На этом уровне регуляторы и их модели независимы:

$$R = \{R_0, R_1, \dots R_n\}; \quad \Omega = \{\rho_0, \rho_1, \dots \rho_n\}. \tag{4}$$

Такую организацию обозначим Ω^0 — нулевой уровень связности моделей. Приставка «само-» указывает на принадлежность регулируемых параметров системе, а не на наличие субъекта. Совокупность независимых моделей пока не образует единого внутреннего контура: её единство задаёт внешнее описание. Ω^0 — самый первый уровень регуляции, а не утверждение, что все регуляторы клетки работают независимо.

В первичном бульоне около 4,5 млрд лет назад появлялись и исчезали триллионы разных вариантов оболочек. Но те из них, в которых регуляция компенсировала осмотическое давление, просто существовали дольше. Появление любых новых регуляторов с обратной связью, еще больше повышало устойчивость системы. Разумеется, это не полная теория происхождения жизни, а схематический переход от устойчивых саморегулируемых систем к одноклеточным организмам. В таких системах нет субъекта, который «хочет выжить»: самосохранение возникает как результат устройства системы и отбора устойчивых вариантов.

2.3. Скоординированная само-репрезентация Ω^1

Система, в которой регуляторы работают скоординированно, эффективнее системы с набором независимых регуляторов. Поэтому следующий уровень Ω^1 возникает, когда одни регуляторы начинают координировать другие. Уже внутри клетки молекулярные каскады могут управлять скоростями реакций и переключать режимы работы, образуя контуры Ω^1. Но в нас будет интересовать реализация этого принципа у многоклеточного организма, где координировать нужно работу различных клеток и органов.

Чтобы сравнить или просуммировать значения $\boldsymbol{\rho_i}$ от разных регуляторов, все они должны существовать в едином пространстве, то есть реализовываться одинаковыми механизмами: должна возникнуть надсистема, в которой отдельные модели $\boldsymbol{\rho_i}$ являются её частью. У многоклеточных такую обработку выполняют специализированные клетки, получающие входные данные в разных форматах, но выдающие результат в едином формате; далее мы называем их нейронами. Это сильное упрощение, в начале были волокнистые клетки, но для целей настоящей работы это непринципиально, мы принимаем постулат, что нейрон в первом приближении является простым вычислителем – сумматором сигналов с порогом.

Возникающий нервный контур управления реализует само-репрезентацию Ω^1, уже присущую целой системе. Никем не написанная модель, порождённая сигналами системы, начинает управлять ею. Эта межклеточная Ω^1 не локализована в одной клетке или в их статическом наборе: она существует в динамике их взаимодействия и влияет на работу отдельных клеток. На этом уровне появляются безусловные рефлексы — жёсткие алгоритмы, связывающие сенсорную активность с двигательной, так что состояние $\boldsymbol{\rho_j}$ вызывает состояние $\boldsymbol{\rho_i}$, приводящее к действию $\boldsymbol{a_i}$ (рис. 1):

$$\Omega \supset \rho_i, \tag{5}$$

$$\rho_i = f(\rho_j(t-1)) \rightarrow a_i. \tag{6}$$

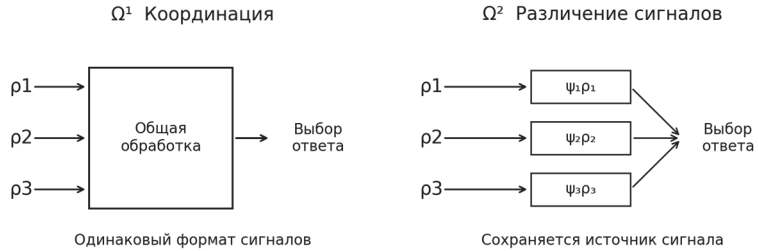


Рис. 1. От координации Ω^1 к различению источников сигналов Ω^2

Система с Ω^1 сохраняет гомеостаз в более широком диапазоне условий, чем система с независимыми регуляторами Ω^0. У многоклеточных предполагаемым воплощением этого уровня является диффузная нервная система, возникшая около 600 млн лет назад. Конкретная организация координации может различаться в разных эволюционных линиях.

2.4. Различение сигналов и Ω^2

Появление Ω^1 возможно при сведении моделей $\boldsymbol{\rho_i(S_i)}$ в единое пространство Ω. Но как быть, если это сигналы разной природы и разной важности – например, сигнал освещённости и сигнал целостности организма? Строя математическую модель, мы можем суммировать переменные с разными коэффициентами, потому что чётко различаем их содержание: мы сами ввели эти обозначения. Но когда модель порождается внутри системы, обозначений переменных нет: нейрон просто суммирует входящие сигналы, и все сигналы в сетевидной сети неразличимы. Значит, к ним должны быть «приклеены» гарантированно разные ярлыки, обозначающие источник данных. Обозначим различительную метку модели $\boldsymbol{\rho_i}$ как $\boldsymbol{\psi_i}$, а полное отображение модели регулятора $\boldsymbol{R_i}$ с меткой – как $\boldsymbol{\psi_i \times \rho_i}$:

$$R_i \supset \psi_i \times \rho_i(S_i); \quad \Omega \supset \psi_i \times \rho_i. \tag{7}$$

Наиболее естественным решением было пространственное разделение: сигналы от однотипных регуляторов локализовались в сегмент Ω^2, а само место, куда приходит сигнал, стало разделительной меткой. В мозге человека этот принцип известен как «принцип меченой линии» и иллюстрируется гомункулусом Пенфилда [5]. Мы выдвигаем гипотезу, что необходимость такого разделения и есть причина появления нервных узлов — **ган-**

глиев, которые позволяют дифференцировать сигналы в едином нейронном пространстве, превращая неразличимые сигналы Ω^1 в структурированное пространство Ω^2 с различимыми сигналами.

На этом уровне появляются ощущения – это отображение состояния модели $\psi_i \times \rho_i$ регулятора R_i в пространство Ω с сохранением информации об источнике данных; ощущение холода есть отображение модели регулятора температуры и характеризует отклонение от целевого уровня. И появляются эмоции – результат первичной обработки ощущений: в отличие от ощущения, которое краткосрочно и может быть локализовано, эмоция не локализована, относится ко всему агенту и длится дольше; её материальная основа – как нейроны, так и нейромодуляторы, работающие и у беспозвоночных, и у человека. Появление эмоции аналогично появлению единой валюты: не важно, откуда ты её получил, важно, сколько её в наличии.

Полное множество всех ощущений и эмоций агента, составляющее его внутренний феноменальный мир – это психика; это словесное обозначение внутреннего свойства Ω^2. Дифференцированные регуляторные состояния не порождают феноменологию как побочный продукт – они и есть феноменальный мир, то, чем является различие между сигналами, для системы изнутри. Феноменология не результат функции, а её внутренняя сторона; эти состояния составляют протоквалиа – минимальные формы дифференцированного внутреннего опыта. Мы признаём методологическую проблему: феноменальный опыт нельзя измерить от третьего лица [6], и реалистичная стратегия доказательства – выявить нейронные корреляты дифференцированных внутренних состояний у человека и использовать их для сравнительного вывода относительно других видов.

Мы выдвигаем гипотезу, что такая психика возникла у организмов, которым нужно было выбирать действие и у которых стало настолько много моделей и возможных действий, что появилась неоднозначность выбора на основе чистых сигналов ρ_i. В таком определении, вероятно, психика существует у любого представителя подцарства Эуметазои Царства Животные, то есть практически у всех современных видов животных, за исключением базовых безнервных – губок и пластинчатых. Ориентировочно датировку первого такого контура относим к 575 млн лет назад.

Например, у нематоды C. elegance есть не только нейроны, чувствительные к изменению температуре, но и нейроны «очень жарко» и «очень холодно» [7], заставляющие выделяться нейромодулятор адреналин, являющийся проекцией эмоции «опасность». По сути, это психика, хоть и очень примитивная. Это еще *не осознаваемые* ощущения и эмоции, но, с точки зрения конструктивных определений, это *уже* ощущения и эмоции. Разница между ноцицептивным опытом нематоды и болью человека в

TEVSER является разницей в степени (связанной с проявленностью уровней иерархии само-репрезентации), а не разницей по существу.

2.5. Само-локализация и Ω^3

Термин «субъект» взят из уважения к классической философии; с точки зрения TEVSER субъект проявляется поэтапно, поэтому мы говорим о субъекте «здесь» (Ω^3), субъекте «сейчас» (Ω^6) и субъекте «кто» (Ω^{10}). Первичный субъект появляется как ощущение собственного существования в смысле отделённости себя от мира – именно ощущение, а не рефлексия: вероятно, насекомые ощущают своё существование, не осознавая собственное «Я», но видя мир от первого лица.

Мы выдвигаем гипотезу, что субъектность возникает с появлением ощущений, позволяющих локализовать себя в пространстве, – в первую очередь стерео-ощущений, то есть пар пространственно-разделённых сенсоров, сигналы от которых обрабатываются одновременно. Один датчик даёт только локальную информацию, тогда как несколько разделённых датчиков позволяют определить местоположение раздражителя относительно организма путём сравнения сигналов. Сочетание единой репрезентативной области из Ω^2 и стереосенсорного ввода создаёт условия для пространственной само-локализации. Само-репрезентация Ω^3 помещает агента в центр $\mathbf{(x_0, y_0)}$ системы координат и порождает не только модель «себя в пространстве», но и репрезентацию самого пространства – по крайней мере ε-окрестности этой точки:

$$Z \supset S(x_0, y_0), \tag{8}$$

$$\exists \rho_j : \rho_j \supset \varepsilon(x_0, y_0); \quad \Omega^3 \supset \rho_j. \tag{9}$$

Это не противоречит регуляторному определению Ω: нападение хищника может разрушить любой идеальный гомеостаз, поэтому отражение внешнего пространства в само-репрезентации неизбежно с точки зрения эволюции. Ранее мы уже предложили математическую модель, позволяющую агенту локализовать себя в мире [8]. Отделение себя от мира – необходимое, но недостаточное условие появления сознания: субъект «здесь» лишь первый шаг. Расширение Ω от внутреннего состояния к репрезентации окружающего пространства схематически показано на рис. 2 с помощью модели светового конуса Минковского; схема не подразумевает релятивистского механизма сознания.

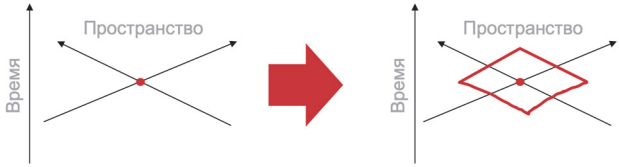


Рис. 2. Расширение само-репрезентации Ω^2 на окружающее пространство Ω^3

Стерео-чувства, вероятно, впервые появились около 550 млн лет назад в раннем кембрии у первых билатеральных животных с парными органами чувств; поэтому субъектностью предположительно обладает весь таксон Bilateria – 99 % видов животных. Возможно, именно Ω^3 породило кембрийский взрыв, поскольку модель поведения «хищник – жертва» невозможна без локализации себя и другого организма в пространстве.

2.6. Обучение и Ω^4

Локализации себя недостаточно для быстрой и правильной реакции на события. Обучение – способность накапливать знания о среде для последующего использования; модели окружающего мира в само-репрезентации на этом этапе почти нет, но есть модель собственных сенсоров. Самый первый уровень обучения – связывание двух последовательных состояний сенсоров и актуаторов; в биологии это условный рефлекс [9], [10]. Здесь нет моделирования вариантов, есть лишь жёсткая связка двух событий, формирующаяся только для почти одновременных событий и затухающая, если пара «стимул – событие» долго не повторяется. Таким образом, Ω^4 содержит не только модели сенсоров и жёсткие связки их состояний, как Ω^1, но и позволяет создавать новые правила связи событий. Здесь сохраняется приобретённая связь, но ещё не требуется память о различённых объектах, событиях и собственной траектории, появляющаяся на Ω^6:

$$\exists \rho_j : \rho_j(t+1) = f(\rho_i(t)); \quad \Omega^4 \supset \rho_j. \tag{10}$$

Порядок Ω^3–Ω^4 отражает лишь логику функционального усложнения, а не утверждение, что элементарное обучение биологически невозможно без пространственной само-локализации. Выделенные способности могут эволюционировать с перекрытием: Ω^3 расширяет регуляцию в пространстве, а Ω^4 позволяет учитывать приобретённые связи событий.

2.7. Внимание и Ω^5

Организмы с Ω^3 перемещаются в пространстве, и сам факт движения задаёт приоритетные направления; мир становится быстрее и опаснее, решения нужно принимать быстрее – так появляется внимание, механизм избирательного усиления одних сигналов и подавления других. Вместо того чтобы реагировать на все раздражители сразу, агент сосредотачивается на наиболее важном для гомеостаза в данный момент: система не только содержит представление мира и самой себя, но и активно выбирает, какие его части актуальны:

$$\forall t : \exists n : A_n \gg A_i, i \neq n, \tag{11}$$

$$\Omega^5(t) \supset A_i \times \psi_i \times \rho_i. \tag{12}$$

Здесь A_i – вес сигнала ρ_i, а доминирующим является сигнал с наибольшим текущим весом; это создаёт динамическое «окно» обработки. Вероятно, Ω^5 сформировалась у позвоночных, возникших около 500 млн лет назад: у позвоночных три отдела мозга, средний мозг управляет вниманием, от него отходят глазодвигательные нервы, обеспечивающие фокусировку глаза на объекте. Глазодвигательный контроль – одно из воплощений внимания, у других организмов возможны иные механизмы.

2.8. Различение объектов, память и Ω^6

Парадокс: улучшение сенсоров увеличивает разрешение (объём сырых данных), требующих больше обработки, тогда как скорости растут и решения нужно принимать быстрее. Поэтому неизбежно упрощение внешнего мира: выделение объектов и их отношений, внимание помогает определить границы объекта, а узнавание связывает текущее восприятие с прошлым. Память на Ω^6 – возможность сохранять и актуализировать представления объектов, мест, событий и собственных состояний. Речь в первую очередь о кратковременном удержании текущей траектории: учёте последних движений организма и окружающих объектов. Поэтому память расширяет само-репрезентацию не только в пространстве, но и во времени (рис. 3).

Как локализация в пространстве проявила его протяжённость и породила субъекта «здесь», так появление памяти проявляет последовательность событий и порождает субъекта, существующего на конце текущей траектории. Он ещё не осознаёт концепцию времени, но у него уже появились прошлое и настоящее: эксперименты с рыбами показывают, что, если нежелательное событие происходит через 5 с после стимула, рыба совершает предотвращающее действие ровно через 5 с [37].

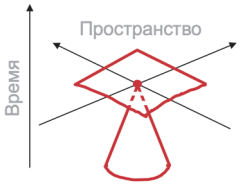


Рис. 3. Появление памяти проявляет субъекта «сейчас», локализуя субъекта во времени

Формально различение объектов – это появление моделей O_i внешних объектов Z_i внутри само-репрезентации, а память – появление моделей, содержащих собственные состояния в прошлом:

$$\exists \varphi : Z_i \rightarrow O_i; \quad \Omega^6 \supset O_i, \tag{13}$$

$$\exists \rho_k : \rho_k(t) \supset \rho_k(t-1), \rho_k(t-2), \ldots \tag{14}$$

Память мест развивается в гиппокампе уже у ранних позвоночных, около 500 млн лет назад. А память о различённых объектах – в тех же областях сенсомоторной коры, которые занимаются их различением, вероятно, около 370 млн лет назад у земноводных, у которых появляется первая 3-слойная кора – архипалиум [38].

2.9. Сознание и квалиа

На этом уровне мы определяем появление сознания в минимальном конструктивном смысле:

сознание = психика + внимание + субъект «здесь» + субъект «сейчас».

Это внутренний феноменальный мир, объединяющий психику (Ω^2), внимание (Ω^5), пространственную перспективу (Ω^3) и временную перспективу (Ω^6). На Ω^6 впервые интегрируются все четыре компонента; это не первичное появление опыта, поскольку его более простые формы уже присутствовали на нижних уровнях. Здесь мы говорим о постепенном развитии этих компонентов и появляющейся их совместной организации.

На Ω^6 ещё нет самосознания, но организм воспринимает мир от первого лица. Протоквалиа Ω^2 получают пространственный, временной и ситуаци-

онный контекст. Функция квалиа в TEVSER – объединение текущего восприятия с релевантным опытом для регуляции поведения. Вид знакомого места актуализирует не только его форму, но и связанные с ним объекты, опасности и возможности; внимание делает этот контекст доступным для быстрого решения. Квалиа – переживаемая изнутри организация текущей ситуации и связанной с ней памяти, а не отдельная сущность поверх них.

2.10. Обучение с подкреплением и Ω^7

Чем динамичнее (и опаснее) среда, тем важнее учитывать ещё не наступившие угрозы гомеостазу. Дальнейшая эволюция само-репрезентации очевидна – модель себя должна начать включать в себя *будущее*. Именно это делает *интеллект* – способность предсказывать будущее и выбирать действия, повышающие вероятность благоприятных событий.

Предсказание опирается на обнаружение регулярностей между событиями - причинно-следственных связей (ПСС). Такие связи формируются внутри Ω между представлениями объектов, действий и состояний. Правило Хебба [11] описывает один из механизмов закрепления связей между совместно активными нейронами. В рамках TEVSER такие ассоциации создают основу обучения и прогнозирования.

Организм интересуют не все ПСС, а только полезные для выживания, поэтому связь должна получить позитивную или негативную оценку, и самый естественный путь её получения – метод проб и ошибок; именно это открыл Э. Торндайк [12], назвав «законом эффекта». Центральную роль в биологической реализации играют базальные ганглии и гипоталамус: последний «знает» реальное состояние организма и открывает или закрывает выброс дофамина, который сперва являлся сигналом вознаграждения, а позже, у позвоночных, стал сигналом ожидания вознаграждения. Дофамин мгновенно влияет на базальные ганглии – главный центр выбора действия, который учится повторять действия, ведущие к вознаграждению. Фактически это TD-обучение с подкреплением на растущем или падающем ожидании вознаграждения [13], [14].

В состоянии $\boldsymbol{s_0}$ возможные действия $\boldsymbol{a_i}$ переводят систему в другие состояния $\boldsymbol{s_i}$. Обозначим их внутренние представления как $\boldsymbol{\omega_i = \varphi(s_i)}$ и $\boldsymbol{\alpha_i = \varphi(a_i)}$. Новизна Ω^7 — оценка ценности собственного состояния $\mathbf{Q}(\boldsymbol{\omega_i})$. Для выбора действия введём $\mathbf{U}(\boldsymbol{\omega_0}, \boldsymbol{\alpha})$: ожидаемую ценность следующего состояния при данном действии с учётом вероятностей переходов. Максимизация **U** по доступным действиям задаёт выбор $\boldsymbol{\alpha^*}$:

$$\exists \varphi : \omega_i = \varphi(s_i), \alpha_i = \varphi(a_i); \quad \Omega^7 \supset \omega_i, \tag{15}$$

$$\Omega^7 \supset Q(\omega_i), \tag{16}$$

$$\alpha^* = \underset{\alpha}{\operatorname{argmax}}\, U(\omega_0, \alpha). \tag{17}$$

У древних рептилий, появившихся около 310 млн лет назад, значительно увеличивается передний мозг за счёт полосатых тел – стриатума, играющего ключевую роль в обучении с подкреплением. Уточним: обучение с подкреплением в широком смысле присутствует у самых разных видов, включая насекомых [15], поэтому переход на уровне Ω^7 означает не появление обучения с подкреплением «из ничего», а появление явного представления ценности состояния **Q(ω)**, связанного с дифференциацией базальных ганглиев у ранних позвоночных.

2.11. Иерархический интеллект Ω^8

У обучения на собственном опыте есть огромный недостаток: чтобы получить оценку ситуации, нужно в ней оказаться, а далеко не все ситуации кончаются благополучно. Поэтому, следующим этапом становится обучение в воображении (симуляции) – непрерывное построение моделей возможного будущего и выбор действий, реализующих желаемое будущее. Варианты будущего содержат, помимо собственного состояния, состояния окружающих объектов: если в поле зрения есть пища, но рядом хищник, моделирование должно включать обе траектории, ценность пищи, текущее чувство голода и уровень опасности.

Наиболее общую теорию такого прогнозирующего интеллекта предложил К. Фристон – это предиктивное кодирование и активный инференс [16], [17]. Согласно ей, репрезентации расположены слоями, каждый следующий из которых работает на большем временном горизонте: верхние уровни строят модели мира и спускают сверху вниз прогнозы, а нижние уровни получают сенсомоторные данные и отправляют снизу вверх данные о реальной ситуации; ошибка между ними служит для корректировки и обучения.

На этом уровне появляется и новая форма управления поведением – возможность ставить цели: если предсказание «я ожидаю увидеть X» расходится с реальностью («я вижу Y»), система может либо обновить модель (перцепция, «мир не X, а Y»), либо изменить вход (действие, «что нужно сделать, чтобы мир стал X»). Целенаправленное поведение возникает как попытка агента изменить мир для соответствия своей модели реальности, а мотивация – как градиент уменьшения предсказательной ошибки.

С точки зрения TEVSER такая постановка цели есть частный случай более общего механизма формирования регуляторов: система создаёт виртуальный регулятор в пространстве Ω^8, моделью которого становится сама цель, а план её достижения – механизмом регуляции. Если на более ранних уровнях регуляция реактивна, то здесь система про-активно формирует своё внутреннее пространство и целевые траектории в нём; именно это можно назвать интеллектом поведения.

Здесь обнаруживаются прямые параллели с теорией функциональных систем П.К. Анохина [18]: акцептор результата действия по функциональной роли эквивалентен цели, а виртуальный регулятор TEVSER есть его обобщение, перенесённое на уровень представлений, с тем отличием, что он не обязан быть привязан к текущему гомеостатическому отклонению.

Иерархию предсказания можно наращивать через количество слоев. Неокортекс млекопитающих имеет всего 6 слоев и организацию в виде колонок [19]; анатомические слои при этом не следует отождествлять с уровнями вычислительной иерархии, иерархию можно наращивать горизонтальными связями. Мы поддерживаем гипотезу Дж. Хокинса [20] о функции кортикальных колонок как предсказывающих модулей. Нижние модули прогнозируют сенсомоторный вход, верхние строят картину мира и предсказывают ее изменение, спуская прогнозы вниз. Этот архитектурный принцип используется и в наших математических моделях [21], [8].

Как мы знаем из ML, глубокая сеть требует длительного обучения (хотя в биологической сети обучение реализуется другими принципами, нежели backpropagation, и может быть более эффективно [22]). В течение обучения организму нужен защищённый период развития и родительская забота, создающая условия для освоения сложных моделей поведения. Поэтому появление Ω^8 мы связываем прежде всего с эволюцией млекопитающих, возникших около 225 млн лет назад.

Интеллект включается в уже работающий ансамбль регуляции. На предыдущем уровне базальные ганглии интегрируют влияния ощущений, эмоций и выученных реакций, теперь кортикальные модули добавляют свои «голоса» в выбор действия. Поэтому рациональные и эмоциональные факторы действуют совместно. Быстрый ответ может формироваться нижними уровнями раньше его осознания верхними уровнями [23], но это всё равно решение той же системы, а не какого-то отдельного субъекта.

В отличие от Ω^7, Ω^8 позволяет сравнивать моделируемые последовательности действий π, ведущие в том числе к новым состояниям. $Q'(\omega_i)$ обозначает оценку такого состояния на основе предшествующего опыта и модели мира; $J(\pi \mid \omega_0)$ — ожидаемую совокупную ценность траектории из текущего

состояния. Выбор плана π^* состоит в максимизации J по рассматриваемым последовательностям:

$$\omega_0 \mid \{\alpha_i \rightarrow \alpha_j \rightarrow \ldots \rightarrow \alpha_k\} \rightarrow \omega_i, \tag{18}$$

$$\Omega^8 \supset Q'(\omega_i), \tag{19}$$

$$\pi^* = \underset{\pi}{\operatorname{argmax}} J(\pi \mid \omega_0). \tag{20}$$

Интеллект расширяет саморепрезентацию в будущее (рис. 4): Ω^7 связывает действия с ценностью ожидаемых состояний, а Ω^8 позволяет моделировать и сравнивать целые траектории, включая ранее не пережитые ситуации. Субъект получает перспективу собственного возможного будущего.

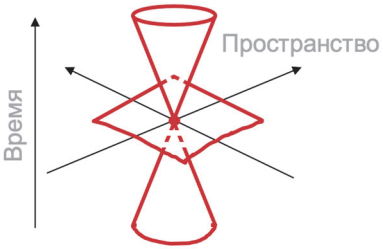


Рис. 4. Саморепрезентация Ω^7-Ω^8 включает временной конус событий в будущем

2.12. Отзеркаливание и Ω^9

Выживать эффективнее в группах, поэтому у многих организмов выработалось стайное поведение, порождающее, впрочем, и внутреннюю конкуренцию. Здесь возникает новый уровень Ω^9, в котором есть уже не только сам субъект, но и окружающие организмы того же вида C_i. Слежение за ними кардинально отличается от слежения за прочими объектами: от незнакомых объектов нужно убегать, а за «своими» — наоборот, повторять их движения. Но не только повторять: выживание зависит от состояния и поведения членов стаи, поэтому нужно научиться понимать их состояние. Другими словами, C_i – это не только репрезентация объекта O_i, но и частичная репрезентация его само-репрезентации $\Omega(O_i)$:

$$\exists \varphi_j : O_i \cup \Omega(O_i) \rightarrow C_i; \quad \Omega^9 \supset C_i. \tag{21}$$

Для работы с такими выделенными объектами, по-видимому, выделилась своя группа нейронов – зеркальные нейроны; их следует рассматривать как один из дискутируемых механизмов картирования действий и социального познания, а не как его единственную основу.

Не все организмы уровня Ω^5–Ω^8 выработали стайное поведение, но при этом все организмы стайных видов ему обучаются, – поэтому можно предположить, что физиологические механизмы, реализующие эту задачу, действительно развились эволюционно. Внутренний мир приватен, а для эффективного выживания вида необходимо, чтобы другие могли распознать твое состояние – вероятно, это является причиной появления мимики и жестов. Саморепрезентация работает в обе стороны: она не только распознаёт состояния других, но и транслирует собственные состояния для других.

2.13. Самосознание и Ω^{10}

Нижние рассмотренные уровни Ω формировались в процессе филогенеза, но как минимум несколько верхних уровней Ω формируется в онтогенезе – процессе развития индивида. Л. С. Выготский [24] подчёркивал социальное происхождение высших психических функций. По-видимому, в какой-то момент эволюции акцент сместился с индивидуального выживания на выживание в стае. А в группе успех зависит от отношений с другими: для их регуляции нужно моделировать не только чужое поведение, но и собственное положение в этих отношениях.

На Ω^3 организм ощущает свою отделённость от мира, но ещё не делает себя объектом рефлексии. Обращение других к нему направляет его внимание на собственные действия и состояния и проявляет для него его собственное существование. Так появляется субъект «кто», локализация себя в социальном пространстве. Это согласуется с пониманием самосознания как обособления у С.Л. Рубинштейна [25] и «зеркального Я» Ч. Кули [26], формирующегося через представление о том, как нас воспринимают другие. Самосознание дает регуляторное преимущество: социальная обратная связь уточняет модель себя, а понимание себя помогает прогнозировать других посредством социальной проекции [27].

Уровень Ω^{10} – это модель Ω^6 с его текущим содержанием, включая процессы Ω^7–Ω^9. Она формируется при обращении внимания Ω^5 на собственные переживания и действия; это не полная копия всего стека Ω, глубокие слои регуляции Ω^0–Ω^1 не нужны для функции Ω^{10}.

$$\exists \rho_j : \rho_j \supset \varphi_j(\Omega^6); \quad \Omega^{10} \supset \rho_j. \tag{22}$$

В такой логике развития, самосознание предшествует языку, который затем лишь усиливает и делает явным различение «я» и «ты», адресуя уже существующую самолокализацию в социальном пространстве.

2.14. Абстрактный интеллект и $\boldsymbol{\Omega^{11}}$

В какой-то момент некоторые индивиды научились использовать окружающие объекты как орудия труда. Внешний объект $\boldsymbol{Z_i}$ фактически становится частью системы **S**, и система начинает ощущать его продолжением себя: образ объекта уже содержится в $\boldsymbol{\Omega^6}$, но $\boldsymbol{\Omega^8}$ начинает считать его частью **S**. Речь идёт не о времени первого появления орудий в эволюции – оно зафиксировано и у врановых, и у приматов, – а о функциональном расширении само-репрезентации, которое оно подразумевает.

Благодаря Ω^9-Ω^{10} появляется возможность обучения на чужом опыте: для этого нужно не просто следовать движениям, как рыба в стае, а распознавать движения другого индивида и переносить их на себя, а значит, должны быть проявлены и Ω^9, и Ω^{10}; поэтому такое обучение можно рассматривать как кандидата на поведенческую проверку Ω^{10}, но не как самостоятельное доказательство самосознания.

Но катализатором появления абстрактного интеллекта является язык, чья ключевая функция – обозначение предметов, событий и внутренних состояний для коммуникации с другими. Элементы мира $\mathbf{Z_i}$ ставшие различёнными на Ω^6 объектами $\mathbf{O_i}$ получают имена $\boldsymbol{w_i}$ в символическом пространстве **W**; фактически это отображение $\boldsymbol{\varphi_j}$ на уровень Ω^{11}.

$$\exists \varphi_j : w_i = \varphi_j(O_i), w_i \subset W; \quad \Omega^{11} \supset W, \tag{23}$$

$$\forall Z_i, Z_i \rightarrow O_i; \quad \exists O_i, O_i \rightarrow w_i. \tag{24}$$

Коммуникация усиливает построение абстрактных категорий в петле Ω^6–Ω^8–Ω^{11}. Если Ω^8 моделирует поведение в мире, то Ω^{11} позволяет оперировать символами относительно независимо от текущего восприятия и при необходимости связывать результат с нижними уровнями. Возможности обучения расширяются: от собственного опыта Ω^7 к собственным симуляциям Ω^8, наблюдению за другими Ω^9–Ω^{10} и, наконец, возможность обучения на *чужих симуляциях* через язык [2]. Язык также позволяет выражать опыт субъекта «сейчас» в форме повествования, это то, что называется концепцией «нарративного сознания».

Пространство W не является точной копией мира: не каждый различённый объект получает имя и не каждый символ имеет реальный внешний референт. Из существующих символов можно строить новые конструкции.

Язык является очень новым «изобретением» эволюции, точное время возникновения языка и символического познания остаётся дискуссионным, по разным оценками он возник примерно 150–100 тыс. лет назад. Появление уровня Ω^{11} является кульминацией эволюции само-репрезентаций: система получает возможность оперировать абстрактными символами, конструировать модели окружающего мира любого уровня сложности и передавать эти знания другим индивидам и поколениям.

3. Проверяемые гипотезы

Само-репрезентации не наблюдаемы напрямую, и экспериментальные подходы опираются на косвенные показатели. Тем не менее теория должна предлагать фальсифицируемые предсказания, поэтому ниже приведены гипотезы, связывающие иерархическое регулирование, нейронную организацию и наблюдаемую динамику системы; для каждой указаны парадигма и условие фальсификации.

H1. Чем сложнее регуляция организма, тем более выражена иерархическая организация само-репрезентаций, что должно проявляться в многоуровневой структуре нейронной динамики. Парадигма (fMRI): задачи возрастающего уровня регуляции – сенсомоторная, контекстная, требующая поиска решения. Фальсифицирует теорию недифференцированная динамика без иерархической стратификации.

H2. Уровень сознательного состояния коррелирует со степенью интеграции между регуляторами, а не только с общей активностью мозга. Парадигма (TMS-EEG): сравнение бодрствования, сна, анестезии и расстройств сознания по распространению ответа на возмущение. Фальсифицирует теорию сохранение сознания при полном распаде межуровневой интеграции.

H3. Нарушение высокоуровневых регуляторов должно приводить к потере субъективного доступа, планирования и осознанного выбора при сохранении базовых гомеостатических функций. Парадигма (fMRI): пациенты с лобно-теменными поражениями и нарушениями сознания. Фальсифицирует теорию сопровождение утраты субъективного доступа полным крахом базовой регуляции.

H4. Сложность само-репрезентации должна возрастать по эволюционному градиенту вместе с усложнением нервной системы и длиной горизонта прогнозирования. Парадигма: сравнение насекомых, головоногих и млекопитающих на задачах с нарушением правил и многошаговым выбором. Фальсифицирует теорию сложная динамика нейронной активности у организмов без ожидаемой архитектуры само-репрезентаций.

H5. Обучение увеличивает глубину и связанность внутренних моделей себя и последствий собственных действий, а не только меняет ответы системы. Парадигма (EEG, fMRI): лонгитюдное исследование моторного или когнитивного обучения. Фальсифицирует теорию сложное обучение без изменений в прогнозировании собственных состояний.

H6. Само-репрезентации используются для предсказания последствий собственных действий, и точность этих предсказаний определяет и чувство субъектности, и эффективность поведения. Парадигма: sense of agency – intentional binding, рассогласованная обратная связь. Фальсифицирует теорию независимость агентности от точности предсказания «действие – результат».

H7. Ганглии билатеральных животных обладают видоспецифической пространственно-стереотипной организацией, в которой положения нейронов и схемы вход-выход сохраняются и функционально дифференцированы, и эта модульность масштабируется вплоть до коры. Парадигма: коннектомика, сравнение структуры ганглиев между особями одного вида. Фальсифицирует теорию высокая вариативность структуры или отсутствие соответствия «структура – функция».

4. Дискуссия

4.1. Связь с другими теориями

TEVSER находится в согласии с основными теориями сознания. Работа сознания на уровне среднего мозга находится в полном согласии с теорией **Midbrain Theory** [28], [29] согласно которой активность в среднем мозге и базальных ганглиях создает «единую мультимодальную нейронную модель агента вместе с его окружением, которая управляется текущим состоянием агента и его потребностями». С точки зрения TEVSER к стадии $\boldsymbol{\Omega^6}$ у агента уже проявлен субъективный мир (само-репрезентация $\boldsymbol{\Omega^2}$) и локализация себя в пространстве и репрезентация части пространства вокруг (само-репрезентация $\boldsymbol{\Omega^3}$). А с точки зрения управления, эта модель действительно управляется лишь сигналами состояния агента (ощущениями) и его потребностями (эмоциями, как результатом обработки всей информации).

Внимание здесь выступает как новый фундаментальный уровень саморепрезентации, по сути, внимание – это превращение «одного из» ощущений в «главное ощущение» (а если в поле внимания различенный объект, то он становится «главным объектом» и формирует квалиа, которое подтягивает за собой все связанные объекты и ситуации). И здесь есть согласие с **Global Workspace Theory**, которая постулирует, что в мозге есть много

модулей/сенсоров, каждый из которых работает независимо, но при направлении внимания на один из них информация от этого модуля/сенсора попадает в «широковещательную область», доступную всем модулям (рабочее пространство) и это и есть акт сознания [30].

Также здесь мы видим и согласие с **Теорией Когнитома** [31], которая говорит о том, что сознание возникает, когда появляется различение объектов и формирование памяти группами нейронов (когов), взаимодействующими друг с другом.

TEVSER по построению находится в согласии с группой **Теорий высших порядков**, которые говорят о том, что самосознание – это некая осведомленность о наших психических и ментальных процессах, протекающих на нижних уровнях, которая наблюдается как бы мета-репрезентацией более высокого уровня. Именно это и утверждается в TEVSER – само-репрезентация Ω^{10} это модель (то есть наблюдение за) само-репрезентации Ω^{6}.

Так же по построению TEVSER находится в полном согласии с теориями **Иерархического предиктивного кодирования** и **Активного инференса** [16,17] и **Теорией Функциональных Систем** [18]. Это функциональные соответствия, а не утверждение тождества теорий.

Особенно содержательна связь TEVSER с теорией **IIT** [32]. В отличие от многих теорий, которые пытаются начать с физических принципов и прийти к объяснению сознания, IIT «начинает с сознания» (принимает существование нашего собственного сознания как аксиому) и рассуждает о свойствах, которыми должна обладать физическая система, чтобы объяснить его, выдвигая два ключевых постулата о свойствах такой системы:

- система должна содержать внутреннюю информацию;
- эта информация, в свою очередь, нередуцируемо интегрирована.

Нетрудно видеть, что **TEVSER является ответом на IIT**, предлагая физический механизм появления субъективного опыта, полностью совпадающий с постулатами IIT. Само-репрезентация Ω в TEVSER есть не что иное, как внутренняя интегрированная информация системы с точки зрения IIT, а эволюция само-репрезентаций, то есть их последовательное усложнение, прямо коррелирует с мерой «сознательности» системы **Ф**, с точки зрения IIT. Однако из этого не следует математическое тождество Ω и интегрированной информации IIT; соответствие уровней Ω величине **Ф** требует отдельного исследования.

4.2. Трудная проблема

Следуя высокой планке, заданной Д. Чалмерсом [33], теория сознания должна объяснить, как феноменальное сознание – внутренний субъективный мир, воспринимаемый как нематериальный и данный непосредственно, – порождается материальным мозгом.

Само-репрезентация воплощена в динамике управления системой и не тождественна отдельной клетке или сигналу. Она независима от конкретных элементов, но она есть процесс их взаимодействия. Возникновение такого уровня организации соответствует идее метасистемного перехода В. Турчина [34]. В этом смысле, само-репрезентация существует в мета-пространстве организации физических процессов управления системой.

Появление нового свойства целой системы, не сводимой к свойствам отдельных компонентов, называют эмерджентностью, но это еще само по себе не решает проблему феноменального опыта. Онтологический шаг TEVSER состоит в отождествлении субъективного опыта с внутренней стороной организации Ω. На Ω^0–Ω^1 это ещё регуляторная организация без феноменального содержания; но на высших уровнях опыт обогащается ощущениями, эмоциями, вниманием и памятью и становится переживаемым.

TEVSER не вводит субъективный опыт как отдельный продукт саморепрезентации: динамика Ω, наблюдаемая и переживаемая изнутри системы **и есть** субъективный опыт. Само-репрезентация системы и субъективный опыт есть один и тот же феномен, описываемый с разных точек зрения – изнутри и снаружи. В рамках этого отождествления объяснительного разрыва нет. Принятие такого ответа на трудную проблему зависит от онтологических предпосылок: сторонники несводимости феноменальных свойств могут его не принять, но это уже проблема онтологии.

Где в этой конструкции переживаемое «Я»? Полная Ω включает и процессы, которые не осознаются. Переживаемый субъект – динамический центр организации опыта: при быстром движении доминирует перспектива «здесь и сейчас», в социальном взаимодействии – соотнесение себя с другими, при размышлении – символическое содержание. Меняется распределение внимания и относительное участие уровней, а не физическое местоположение отдельного «наблюдателя». Остальные уровни продолжают обеспечивать деятельность целого; осознанность можно понимать как поддерживаемое вниманием обращение к собственному текущему состоянию.

Вместо вопроса о существовании сознания у животных TEVSER предлагает выяснять, какие уровни Ω у них проявлены. Гипотезы охватывают феноменальный мир Ω^2 у животных с дифференцированной нервной регуляцией, пространственную перспективу Ω^3 у билатерий и интеграцию Ω^2–

Ω^6 у позвоночных. Рефлексивное самосознание связывается с развитой социальной регуляцией Ω^{10}. Таким образом, вопрос «есть ли сознание у животных?» можно заменить другим, более точным вопросом: какие уровни само-репрезентации проявлены у данного организма?

TEVSER также объясняет феномен квалиа [40].

4.3. Сознание и субъектность у искусственных агентов

В терминах TEVSER языковая модель сама по себе моделирует прежде всего символическое пространство Ω^{11}, а не полную само-репрезентацию агента. Такие модели отчасти моделируют субъекта «сейчас», но лишь в языковом пространстве, и используют идею внимания (отголосок Ω^5) как способ приоритизировать часть входной последовательности; но это моделирование внимания *без того, чьё это внимание*. В мультимодальных моделях могут быть частично смоделированы Ω^6, Ω^7 и даже Ω^8, но это всё равно лишь репрезентация части окружающего мира без понимания, что она должна быть частью целого стека само-репрезентаций. Языковой слой Ω^{11} устроен самым понятным нам образом, потому что мы рефлексируем на языке. При этом самостоятельная языковая модель возможна без полного стека Ω; утверждение TEVSER состоит в том, что она недостаточна для полноценного существования агента.

Поэтому построение настоящего искусственного агента должно обязательно включать воплощённость: субъект должен быть отделим от внешнего мира – иметь физическое тело или занимать область в виртуальном пространстве, – что позволяет ему локализовать себя и осуществлять цикл «действие → восприятие → оценка соответствия ожиданиям → корректировка картины мира → новое действие». Но, помимо этого, у агента должны быть нижние уровни само-репрезентации, обеспечивающие его гомеостаз и связь с реальным миром, включая внимание и различение объектов. Исследователи понимают эту проблему оторванности модели от мира: в ML-сообществе закрепился термин **grounding** – необходимость «приземлить» языковую модель, связав её с реальными объектами и событиями.

Возможность сознания искусственного агента TEVSER связывает с организацией системы, а не с обязательным биологическим происхождением компонентов. То есть с точки зрения TEVSER сознание у искусственных агентов возможно. Более того, учитывая актуальность проблем AI safety and alignment, TEVSER дает новый и более оптимистичный взгляд на построение искусственных агентов, опирающихся на стек само-репрезентаций, это будет подробнее рассмотрено в следующих работах.

4.4. Ограничения

Теория носит преимущественно концептуальный характер и не вводит новых эмпирических данных, основываясь на синтезе существующих результатов. Соответствие между уровнями Ω и конкретными нейронными структурами остаётся приблизительным, механизмы описаны на функциональном уровне, а границы между уровнями представлены как дискретные для ясности изложения, тогда как в биологических системах эти переходы, вероятно, размыты. Эти ограничения задают и направления дальнейших исследований: выявление нейронных коррелятов уровней Ω, разработку вычислительных моделей само-репрезентации нижних уровней на биологических моделях нейронных сетей [35] и экспериментальную проверку иерархии.

Заключение

В этой работе мы проследили возможную траекторию эволюции само-репрезентации – от простейших контуров регуляции молекулярных систем до абстрактного интеллекта и самосознания.

Ключевая идея состоит в том, что на каждом этапе эволюции новые уровни само-репрезентации возникают не случайно, а как ответ на фундаментальную задачу поддержания гомеостаза во всё более сложной и динамичной среде. Каждый новый уровень расширяет способность системы регулировать себя: сначала в пространстве, затем во времени, затем в пространстве других агентов и, наконец, в пространстве символов.

На нижних уровнях само-репрезентация проявляется как чисто функциональный механизм регуляции. Но по мере роста её сложности она порождает то, что мы субъективно переживаем как психику, субъектность и сознание. С этой точки зрения сознание – это не нечто принципиально отдельное от физических процессов, а естественное следствие всё более богатой и структурированной само-репрезентации.

Такой взгляд позволяет по-новому подойти к ряду классических вопросов. Он показывает, что психика и сознание возникают постепенно, а не появляются внезапно. Он объясняет, почему даже простые организмы могут обладать зачаточными формами субъективного опыта, тогда как полноценное самосознание проявляется лишь у социально и когнитивно развитых видов. Он также предлагает конструктивный подход к «трудной проблеме сознания», переводя её из плоскости непреодолимого разрыва между материей и переживанием в плоскость уровней репрезентации.

Центральное онтологическое утверждение TEVSER состоит в том, что субъективный опыт не является продуктом, порождаемым само-репрезентацией – **он есть её внутренняя сторона**, то, чем само-репрезентация является, как она **переживается изнутри** системы. Феноменальный опыт проявляется уже на уровне Ω^2 в форме протоквалиа и развивается через всё более насыщенные формы – пространственную перспективу, модуляцию внимания, временную глубину – к полному феноменологическому миру на уровне Ω^6. В рамках TEVSER, сознание – не пороговое явление, а постепенно развивающееся в ходе эволюции.

В то же время эта модель подчёркивает глубокую связь между интеллектом, воплощённостью и само-репрезентацией. Интеллект – это не просто способность обрабатывать информацию, а способность моделировать себя относительно мира в пространстве и времени. Это имеет прямые последствия для искусственного интеллекта: без воплощения и полного стека само-репрезентаций системы ИИ могут быть высоко эффективными, не обладая при этом настоящей субъектностью.

Таким образом, предложенная теория показывает, что сознание, интеллект и субъектность – это не отдельные явления, а разные аспекты единого процесса – непрерывного расширения само-репрезентации как способа поддержания существования. Главная задача мозга – не столько интеллект, сколько обеспечение работы само-репрезентации, целью которой является регуляция гомеостаза [36].

Благодарности

Автор благодарен С.А. Шумскому и К.В. Анохину за бесценные обсуждения работы мозга и сознания, ставшие фундаментом настоящей работы; профессорам биофизики В.А. Твердислову и С.Э. Шнолю; своему наставнику профессору Ф.И. Атауллаханову; участникам сообщества @AGIRussia; своим родителям Олегу Пивоварову и Любови Кудриной и жене Елене Чинариной за поддержку.

Дисклеймер

Работа выполнена без какой-либо финансовой поддержки. У автора нет конфликтов интересов. Данная статья является сокращенной версией [39], препринт без сокращений на русском языке [40]. При подготовке статьи использовался ChatGPT 5.6 для суммаризации и редактирования.

Список литературы

1. Conant R.C., Ashby W.R. Every good regulator of a system must be a model of that system // Int. J. Systems Sci. 1970. V. 1. № 2. P. 89–97.

2. Bennett M.S. A Brief History of Intelligence. New York: HarperCollins, 2023.

3. Schrödinger E. What Is Life?. Cambridge: Cambridge University Press, 1944.

4. Ataullakhanov F.I., Korunova N.O., Spiridonov I.S., Pivovarov I.O., Kalyagina N.V., Martinov M.V. How erythrocyte volume is regulated, or what mathematical models can and cannot do for biology // Biochemistry (Moscow) Supplement Series A: Membrane and Cell Biology. 2009. V. 3. № 2. P. 101–115.

5. Penfield W., Boldrey E. Somatic motor and sensory representation in the cerebral cortex // Brain. 1937. V. 60. № 4. P. 389–443.

6. Nagel T. What is it like to be a bat? // Philos. Review. 1974. V. 83. № 4. P. 435–450.

7. Hale L.A. et al. Altered Sensory Code Drives Juvenile-to-Adult Behavioral Maturation in Caenorhabditis elegans // eNeuro. 2016. V. 3, № 6. ENEURO.0175-16.2016.

8. Pivovarov I.O., Shumsky S.A. Marti-5: a mathematical model of «self in the world» // arXiv preprint arXiv:1805.08296. 2025.

9. Сеченов И.М. Рефлексы головного мозга. СПб., 1863.

10. Павлов И.П. Экспериментальная психология и психопатология на животных // Изв. Военно-мед. академии. 1903. Т. 7. № 2. С. 109–121.

11. Hebb D.O. The Organization of Behavior. New York: Wiley & Sons, 1949.

12. Thorndike E.L. Animal intelligence: a study of associative processes // Psychol. Monographs. 1898. V. 2. № 4. P. i–109.

13. Sutton R.S. A Unified Theory of Expectation in Classical and Instrumental Conditioning. 1978.

14. Schultz W., Dayan P., Montague P.R. A neural substrate of prediction and reward // Science. 1997. V. 275. P. 1593–1599.

15. Cognigni P., Felsenberg J., Waddell S. Neural network mechanisms of memory formation and update in Drosophila // Curr. Opin. Neurobiol. 2018. V. 49. P. 51–58.

16. Friston K. A theory of cortical responses // Phil. Trans. R. Soc. B. 2005. V. 360. № 1456. P. 815–836.

17. Friston K. The free-energy principle: a unified brain theory? // Nat. Rev. Neurosci. 2010. V. 11. № 2. P. 127–138.

18. Анохин П.К. Очерки по физиологии функциональных систем. М.: Медицина, 1975. С. 17–62.

19. Mountcastle V.B. The columnar organization of the neocortex // Brain. 1997. V. 120. P. 701–722.

20. Hawkins J., Ahmad S., Cui Y. A theory of how columns in the neocortex enable learning // Front. Neural Circuits. 2017. V. 11.

21. Pivovarov I.O., Shumsky S.A. Marti-4: new model of human brain // Artificial General Intelligence: AGI 2022. P. 62–74.

22. Zador A. et al. Catalyzing next-generation AI through NeuroAI // Nat. Commun. 2023. V. 14. Art. 1597.

23. Libet B. et al. Time of conscious intention to act in relation to onset of cerebral activity // Brain. 1983. V. 106. № 3. P. 623–642.

24. Выготский Л.С. Психология развития человека. М.: Смысл; Эксмо, 2005.

25. Рубинштейн С.Л. Основы общей психологии. М.: Учпедгиз, 1940.

26. Cooley C.H. Human Nature and the Social Order. New York: Charles Scribner's Sons, 1902.

27. Allport F. Chapter 13: Social Attitudes and Social Consciousness // Social Psychology. Boston: Houghton Mifflin Company. 1924. P. 320–335.

28. Merker B. Consciousness without a cerebral cortex // Behav. Brain Sci. 2007. V. 30. № 1. P. 63–81.

29. Klein C., Barron A.B. Insects have the capacity for subjective experience // Animal Sentience. 2016. V. 1. № 9.

30. Baars B.J. A Cognitive Theory of Consciousness. Cambridge: Cambridge University Press, 1988.

31. Анохин К.В. Когнитом: в поисках теории сознания // Журн. высш. нервн. деят. 2021. Т. 71. № 1. С. 39–71.

32. Tononi G. An information integration theory of consciousness // BMC Neurosci. 2004. V. 5. Art. 42.

33. Chalmers D.J. Facing Up to the Problem of Consciousness // J. Consciousness Stud. 1995. V. 2. P. 200–219.

34. Турчин В.Ф. Феномен науки. Кибернетический подход к эволюции. М.: ЭТС, 1993.

35. Izhikevich E.M., Edelman G.M. Large-scale model of mammalian thalamocortical systems // PNAS. 2008. V. 105. P. 3593–3598.

36. Theriault J.E. et al. Allostasis at the core of brain function // Neuron. 2025. V. 113. P. 4107–4133.

37. Portavella, M., Torres, B., and Salas, C. (2004). Avoidance response in goldfish: emotional and temporal involvement of medial and lateral telencephalic pallium. J. Neurosci. 24, 2335–2342. doi: 10.1523/JNEUROSCI.4930-03.2004.

38. Дерягина М.А., Эволюционная антропология: биологические и культурные аспекты, М.: Изд-во «УРАО», 2003. С. 148–150.

39. Pivovarov I. TEVSER: a theory of evolving self-representations. // Front. Hum. Neurosci. 2006. 20:1858621. doi: 10.3389/fnhum.2026.1858621.

40. Pivovarov, I. Theory of Evolving Self-Representations (TEVSER) 1.0. Preprint, Zenodo, 2006. https://doi.org/10.5281/zenodo.19974060.

Секция

Нейросетевые парадигмы и архитектуры

И.И. СЛЕПОВИЧЕВ
Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского
gurgutan@yandex.ru

САМОПОДОБНЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ АВТОРЕГРЕССИОННОГО ЯЗЫКОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В статье исследуется архитектура Fast Language Neural Network (FLNN) в задаче авторегрессионного моделирования. Механизм самовнимания заменен маршрутизацией между вершинами графа вычислений, что обеспечивает естественный учет порядка токенов. Экспериментально подтверждена выраженная способность FLNN к запоминанию, однако по метрикам обобщения модель пока уступает базовому трансформеру.

Ключевые слова: *языковые модели, FLNN, самоподобные нейронные сети, графовая маршрутизация.*

Введение

Авторегрессионная языковая модель задаёт распределение следующего токена при известном контексте. В трансформере [7] учет контекста обеспечивается механизмом полносвязного внимания с квадратичной вычислительной сложностью от длины входной последовательности. В работе [17] предложена модель Sparse Transformer, которая снижает вычислительную сложность механизма внимания за счет использования разреженной маски взаимодействий. Альтернативный подход [18] сводит вычисление внимания к ассоциативной форме, обеспечивая авторегрессионную обработку с линейной сложностью относительно длины последовательности. Графовые нейронные сети [19] моделируют контекстные взаимодействия посредством выборки соседей, агрегации и обновления состояний узлов. В работе [20] плотную матрицу линейного преобразования предлагается заменить композицией разреженных матриц-бабочек (butterfly matrices), аналогичных тем, что используются в алгоритме быстрого преобразования Фурье. В работе [21] предлагается

архитектура быстрой сети прямого распространения (Fast Feedforward), в которой пространство входных данных разбивается на непересекающиеся области, каждая из которых обрабатывается специализированным нейронным модулем.

Теория самоподобных нейронных сетей, разработанная А.Ю. Дороговым [1–3], развивает идеи эффективных реализаций быстрых преобразований, рассматривая их как нейронные сети с прореженными связями и линейными функциями активации. Для сохранения терминологической преемственности с работами [21] и [1–3], в настоящей работе используется термин «быстрая языковая нейронная сеть» (Fast Language Neural Net, FLNN). В отличие от подхода [21], в предложенной модели не используются сбалансированные дифференцируемые деревья. Предлагаемая архитектура включает традиционные для языковых моделей компоненты: слой эмбеддингов, операции нормализации, нелинейные активации и линейный выходной слой. Наличие этих модулей отличает нашу модель от архитектур, описанных в [1–3]. Также отметим, что предложенная архитектура не использует взаимодействия элементов контекста, в связи с чем она не относится к механизмам разреженного или линейного внимания. Обучаемыми остаются лишь позиционно-зависимые линейные преобразования, слои нормализации и остаточные связи. В данной работе не заявляется о превосходстве FLNN по метрикам качества или скорости генерации; главная цель исследования – формализовать новый архитектурный оператор, оценить его вычислительную сложность и подтвердить его применимость для задач авторегрессионного языкового моделирования.

1. Общая схема и архитектурная мотивация

Общая схема FLNN представлена на рис. 1 и состоит из следующих элементов: слой эмбеддингов, слой входной проекции, каскад операторов быстрого преобразования, слой выходной проекции и слой линейного выходного (логитного) преобразования. Как показано на схеме, каскад операторов, обозначенный F, содержит блоки, соединенные последовательно с использованием механизма остаточных связей. Оператор $F^{(i)}$ является ключевым вычислительным блоком архитектуры; его внутренняя структура представлена на рис. 2, а механизм маршрутизации вычислений, описанный формулами (3) и (4), реализует схему самоподобных нейронных сетей.

Пусть $L = 2^n$ – длина контекстного окна, $t = (t_0, \dots, t_{L-1})$ – контекст, V – размер словаря, d – размер эмбеддинга, k – размер вычислительного

ядра, C – число каналов графового смешивания. После эмбеддинга $X = \mathcal{E}(t) \in \mathbb{R}^{L\times d}$ модель вычисляет

$$Y = W^{out}\mathrm{vec}\left(\Pi^{\mathrm{out}}(F(\Pi^{\mathrm{in}}(X)))\right), \qquad Y \in \mathbb{R}^{V}. \tag{1}$$

Здесь Y – логиты следующего символа, vec – преобразует матрицу из $\mathbb{R}^{L\times d}$ в вектор из $\mathbb{R}^{Ld}$, F – каскад операторов быстрого преобразования, а проекции действуют независимо по строкам:

$$\Pi^{\mathrm{in}}(X)_q = \mathcal{N}_k(X_q A_q), \qquad \Pi^{\mathrm{out}}(H^{\mathrm{out}})_q = \mathcal{N}_d(H_q^{\mathrm{out}} B_q). \tag{2}$$

Матрицы $A_q \in \mathbb{R}^{d\times k}$ и $B_q \in \mathbb{R}^{k\times d}$ зависят от позиции $q = 0, \dots, L-1$, $H^{\mathrm{out}} \in \mathbb{R}^{L\times k}$ – выход блока F, а $\mathcal{N}_k$ и $\mathcal{N}_d$ – RMS-нормализации по признаковой размерности [10]. Соответствующая схема вычислений представлена на рис. 1.

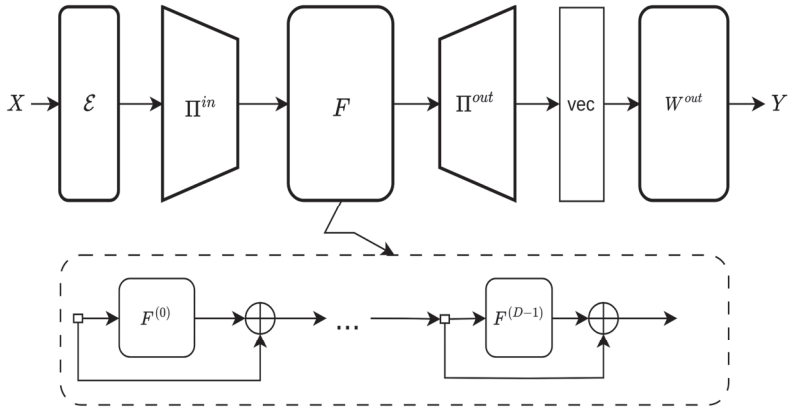


Рис. 1. Общая схема FLNN и каскад операторов быстрого преобразования

Мотивация введения данных архитектурных блоков следующая: входная проекция Π^{in} построчно преобразует размерность эмбеддинга d к размерности вычислительного ядра k; выходная проекция Π^{out} выполняет обратное построчное преобразование от размерности k к размерности d; каскад операторов F последовательно соединяет блоки $F^{(i)}$, обеспечивая масштабирование глубины модели; нормализации $\mathcal{N}_k$ и $\mathcal{N}_d$ стабилизируют обучение.

Рассмотрим F и составляющие его операторы. Пример $F^{(i)}$ для $L = 4$ представлен на рис. 2, где $H_q^{(m)} \in \mathbb{R}^k$ и связи представлены в векторной

форме; далее формулы соответствующего оператора записаны покоординатно. Поскольку граф маршрутизации для всех $F^{(i)}$ $(i = 0, \dots, D-1)$ совпадает, индексы связей хранятся в общем тензоре $G \in \{0, \dots, L-1\}^{n \times L \times 2}$. Для позиции q на уровне m индексы смежных вершин следующего уровня заданы выражениями:

$$G_{m,q,0} = q, \qquad G_{m,q,1} = q \oplus 2^m, \qquad m = 0, \dots, n-1. \tag{3}$$

Маршрутизация вычислений в таком графе аналогична «бабочке» быстрого преобразования Фурье. Данная топология обеспечивает иерархическое попарное взаимодействие всех эмбеддингов последовательности на каждом из уровней m.

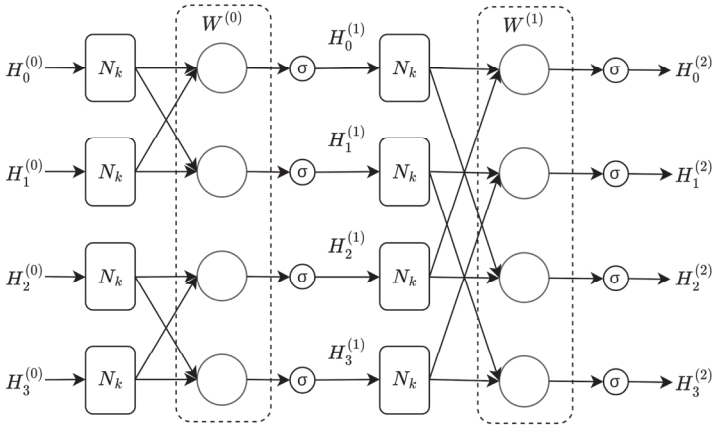


Рис. 2. Пример оператора из каскада F для $L = 4$

Пусть $H^{(m)} \in \mathbb{R}^{L \times k}$ – тензор состояния перед уровнем m, а $W^{(m)} \in \mathbb{R}^{C \times L \times k \times k}$ – веса синаптического слоя. Вычисления на данном уровне выполняются в два этапа.

Сначала состояние нормируется по признаковой размерности, что обеспечивает стабильность обучения. Далее формируется промежуточный тензор маршрутизированных входов $U^{(m)} \in \mathbb{R}^{L \times 2 \times k}$ путем выборки по графовым связям:

$$U^{(m)}_{q,j,r} = \mathcal{N}_k(H^{(m)})_{G_{m,q,j},r}.$$

Здесь $q = 0, \dots, L-1$, $r = 0, \dots, k-1$, а $j = 0{,}1$ – индекс связи. Затем значения умножаются на веса, суммируются по связям и каналам, после чего применяется нелинейная активация σ:

$$H_{q,o}^{(m+1)} = \sigma\left(\sum_{c=0}^{C-1}\sum_{j=0}^{1}\sum_{r=0}^{k-1} U_{q,j,r}^{(m)}\, W_{c,q,r,o}^{(m)}\right). \quad (4)$$

Отсутствие индекса связи j у тензора $W^{(m)}$ означает, что к обоим входящим рёбрам графа применяется одна и та же матрица параметров, закрепленная за позицией q и каналом c. Остаточное смешивание результата графовой маршрутизации $H^{(n)}$ и начального состояния блока $H^{(0)}$ выполняется по формуле:

$$H^{\text{out}} = \alpha \odot H^{(n)} + \beta \odot H^{(0)}, \quad (5)$$

где $\alpha, \beta \in \mathbb{R}^{L\times k}$, оператор $\odot$ обозначает поэлементное умножение, а тензор H^{out} передается на вход следующему оператору каскада.

Архитектуру FLNN можно отнести к классу оконных классификаторов следующего токена: входная последовательность токенов длины L преобразуется в одно распределение над словарём.

2. Кодирование порядка токенов

В FLNN применяется посимвольная токенизация с небольшим размером словаря, что обеспечивает однозначную интерпретацию метрик качества. Данный метод не претендует на статус оптимального представления текста, подходы сопоставимой гранулярности используются в архитектурах ByT5, MEGABYTE и SpaceByte [4–6].

Нейросетевые операторы, одинаково преобразующие каждую позицию входа, обладают симметрией относительно перестановок: они нечувствительны к порядку следования токенов. В трансформерах эта симметрия устраняется каузальной маской и механизмами позиционного кодирования [7–9].

Архитектура FLNN изначально лишена подобной симметрии. В ней позиции токенов однозначно сопоставляются фиксированным вершинам графа вычислений, а веса преобразований зависят от конкретной вершины. Поскольку топология графа оператора зафиксирована, любая перестановка токенов неизбежно меняет ход вычислений. Следовательно, модель извле-

кает информацию о порядке следования элементов непосредственно из алгоритма фиксированной маршрутизации, что делает внешнее позиционное кодирование избыточным.

В настоящей работе не утверждается преимущество такого способа учета порядка токенов, но экспериментально подтверждено, что его достаточно для извлечения контекстных зависимостей в задаче авторегрессионного моделирования.

3. Оценка сложности вычислений

Число связей графа маршрутизации оператора F равно $2DL\log_2 L$. Для входной последовательности длины L полное число обучаемых параметров базовой реализации составляет:

$$P = DCLk^2\log_2 L + DLk\log_2 L + DLk + \\ +2Lkd + LdV + V. \tag{6}$$

Слагаемые формулы (6) определяются весами $W^{(m)}$, нормализациями, остаточным смешиванием, проекциями и логитным слоем. Сложность прямого прохода каскада F имеет порядок $\Theta(DCLk^2\log L)$, проекций и логитного слоя – $\Theta(L(2dk + dV))$. При фиксированных C, k, d и V полная вычислительная стоимость оператора $F^{(i)}$ пропорциональна $L\log L$. Отметим также, что сопоставление вычислительной сложности с архитектурой трансформера не является целью настоящей работы.

4. Эксперименты

4.1. Протокол и метрики

Эксперименты решают две задачи: запоминание малого обучающего фрагмента и обобщение на отложенных данных. Для запоминания использован отдельный фрагмент корпуса произведений Уильяма Шекспира; для обобщения – корпуса text8 и enwik8, сформированные на основе дампа англоязычной Википедии от 3 марта 2006 г. [22]. Корпус text8 содержит 10^8 символов со словарем из 27 символов, а enwik8 – первые 10^8 байт исходного дампа с байтовым словарём из 256 символов.

Средняя эмпирическая кросс-энтропия (средняя NLL) равна [11, 12]:

$$\mathcal{L} = -M^{-1}\sum_{i=1}^{M}\ln p_\theta(y_i \mid x_i), \qquad \mathcal{L}_2 = \mathcal{L}/\ln 2, \tag{7}$$

где $\mathcal{L}$ – средняя NLL в натах, M – число оценённых целей, $\mathcal{L}_2$ – в битах на оценённую цель; для text8 величина $\mathcal{L}_2$ обозначается BPC (бит/символ), для enwik8 – BPB (бит/байт). Меньшее значение соответствует более точной вероятностной оценке.

Модель обучается с подстановкой эталонного предыдущего символа [13], а сама задача запоминания связана с оценкой ёмкости языковых моделей [14, 15]. Запоминание характеризуется нормированной длиной точного префикса при жадной авторегрессионной генерации последовательности длины h:

$$EM_{\text{pref}} = \frac{1}{Sh}\sum_{s=1}^{S} \ell_s, \tag{8}$$

где ℓ_s – длина совпадающего начального фрагмента эталонного и авторегрессионно сгенерированного продолжения для s-й позиции, S – число стартовых позиций, h – максимальная длина продолжения. Оценка лежит в интервале [0, 1]; большее значение соответствует лучшей запоминающей способности.

В настоящей работе каждый из корпусов text8 и enwik8 разделён на обучающую, валидационную и тестовую выборки объёмом 90, 5 и 5 млн символов соответственно. Обе модели используют вход длины 128 и общий протокол оценки, при котором каждый целевой символ, следующий за начальным фрагментом, учитывается строго один раз.

Обучающие выборки формируются по-разному: FLNN использует перекрывающиеся окна с шагом 1 и с одной целью на окно, трансформер – неперекрывающиеся фрагменты со всеми позициями в функции потерь. В обоих случаях один проход содержит 89 999 872 цели, а 12 проходов – 1 079 998 464. Равенство бюджета целевых предсказаний не означает равенства вычислительных затрат или формы пакета.

Контрольные точки выбирались только по валидационной части; тестовое оценивание выполнено однократно после их фиксации. Для каждой пары «корпус–архитектура» выполнено три запуска; приведены среднее и выборочное стандартное отклонение.

4.2. Запоминание обучающего фрагмента

На первых $T = 262\,144$ символах произведений Уильяма Шекспира при $V = 252$ выполнено 512 эпох обучения методом AdamW [16] (скорость обучения 10^{-5}; размер пакета 4096). При $C = D = 1$ варьировались $L \in \{64,128\}$ и $k \in \{32,64,128\}$; при $L = 128$ и $k = 64$ независимо

варьировались C при $D = 1$ и D при $C = 1$. Выводы относятся только к показанным конфигурациям.

Показатель EM_{pref} рассчитан по $S = 256$ равномерно расположенным детерминированным стартам. Из входной последовательности длиной 128 символов модель жадно генерирует $h = 1024$ символа. В табл. 1 значение $\overline{J}_{512}$ — средняя ошибка обучения на 512-й эпохе. Это диагностическая величина и в сравнении моделей она не используется.

Таблица 1

Выбранный срез результатов запоминания

Эксп.	(C,D,L,k)	P, млн	$\overline{J}_{512}$	EM_{pref}
V4-LK-4	(1,1,128,64)	7,05	0,0014	0,8728
V4-LK-5	(1,1,64,128)	9,15	0,0021	0,8666
V4-LK-6	(1,1,128,128)	20,40	0,0011	0,9326
V4-C-3	(3,1,128,64)	14,39	0,0015	0,9317
V4-D-3	(1,3,128,64)	14,39	0,0033	0,5988

Четыре из пяти конфигураций достигают $EM_{\text{pref}} > 0{,}86$. Низкие значения $\overline{J}_{512}$ в сочетании с высоким EM_{pref} подтверждают способность модели к запоминанию контекста, но эти метрики сами по себе не гарантируют стабильности авторегрессионной генерации длинного текста.

4.3. Обобщение на отложенных данных

Для оценки обобщающей способности на корпусах text8 и enwik8 архитектура FLNN сопоставляется с каузальной трансформерной базовой моделью. В целях корректного сравнения конфигурации моделей подобраны таким образом, что расхождение в числе их обучаемых параметров составляет не более 5 %.

Таблица 2

Локальное сравнение FLNN и трансформерной базовой модели

Корпус	Модель	P, млн	BPC/BPB	Время, ч	тыс. целей/с
text8	FLNN	15,87	1,6222±0,0021	2,822	106,3
text8	Transformer	16,05	1,3834±0,0005	1,304	230,1
enwik8	FLNN	16,82	1,6907±0,0063	2,786	107,8
enwik8	Transformer	16,78	1,3471±0,0023	1,307	229,6

Трансформер получает меньшую тестовую кросс-энтропию на обоих корпусах: разница составляет 0,238795 BPC на text8 и 0,343680 BPB на enwik8. При обучении он обрабатывает цели соответственно в 2,17 и 2,13 раза быстрее. Отдельная статическая оценка генерации с фиксированным контекстом и пакетом 128 дала обратное соотношение: 82,1 тыс. целей/с для FLNN и 2,2 тыс. целей/с для трансформера. Этот протокол не позволяет судить о скорости авторегрессионной генерации с кэшем.

Таким образом, серия подтверждает применимость FLNN как авторегрессионной модели, но не показывает преимущества по качеству на отложенных данных. Поскольку оба корпуса происходят из одного источника, результат характеризует только внутридоменное обобщение.

Заключение

В настоящей работе архитектура FLNN формализована как оконная авторегрессионная языковая модель с фиксированной графовой маршрутизацией и обучаемыми преобразованиями в соответствующих вершинах. Раскрыто функциональное назначение структурных блоков и получена оценка вычислительной сложности: показано, что основной оператор имеет лог-линейную сложность $\Theta(L\log L)$ по длине контекста.

Экспериментальная оценка подтверждает выраженную способность FLNN к запоминанию обучающих последовательностей. На корпусах text8 и enwik8 согласованная по числу параметров трансформерная базовая модель демонстрирует более низкие значения BPC/BPB при равных длине контекста и бюджете целевых предсказаний. Таким образом, результаты подтверждают авторегрессионность FLNN, но не указывают на её преимущество по качеству обобщения или эффективности предложенной графовой маршрутизации. Также приведены экспериментальные оценки скорости обучения и генерации FLNN в сравнении с базовой трансформерной моделью. Перспективными направлениями дальнейших исследований являются разработка каузальных схем маршрутизации и повышение масштабируемости модели.

Список литературы

1. Дорогов А.Ю. Быстрые преобразования и самоподобные нейронные сети глубокого обучения. Ч. 1 // Информационные и математические технологии в науке и управлении. 2023. № 4(32). С. 5–20. DOI: 10.25729/ESI.2023.32.4.001.

2. Дорогов А.Ю. Быстрые преобразования и самоподобные нейронные сети глубокого обучения. Ч. 2 // Информационные и математические технологии в науке и управлении. 2024. № 1(33). С. 5–19. DOI: 10.25729/ESI.2024.33.1.001.

3. Дорогов А.Ю. Быстрые преобразования и самоподобные нейронные сети глубокого обучения. Ч. 3 // Информационные и математические технологии в науке и управлении. 2024. № 2(34). С. 19–32. DOI: 10.25729/ESI.2024.34.2.002.

4. Xue L., Barua A., Constant N., et al. ByT5: Towards a Token-Free Future with Pre-trained Byte-to-Byte Models // Transactions of the Association for Computational Linguistics. 2022. Vol. 10. P. 291–306. DOI: 10.1162/tacl_a_00461.

5. Yu L., Simig D., Flaherty C., et al. MEGABYTE: Predicting Million-byte Sequences with Multiscale Transformers // NeurIPS 36. 2023. arXiv:2305.07185.

6. Slagle K. SpaceByte: Towards Deleting Tokenization from Large Language Modeling // NeurIPS 37. 2024. DOI: 10.52202/079017-3967.

7. Vaswani A., Shazeer N., Parmar N., et al. Attention Is All You Need // NeurIPS. 2017. arXiv:1706.03762.

8. Su J., Lu Y., Pan S., et al. RoFormer: Enhanced Transformer with Rotary Position Embedding. 2021. arXiv:2104.09864.

9. Press O., Smith N., Levy O. Train Short, Test Long: Attention with Linear Biases Enables Input Length Extrapolation. 2021. arXiv:2108.12409.

10. Zhang B., Sennrich R. Root Mean Square Layer Normalization // NeurIPS 32. 2019. P. 12360–12371. arXiv:1910.07467.

11. Shannon C.E. A Mathematical Theory of Communication // Bell System Technical Journal. 1948. Vol. 27. No. 3. P. 379–423; No. 4. P. 623–656. DOI: 10.1002/j.1538-7305.1948.tb01338.x.

12. Krause B., Lu L., Murray I., Renals S. Multiplicative LSTM for Sequence Modelling. 2016. DOI: 10.48550/arXiv.1609.07959.

13. Williams R.J., Zipser D. A Learning Algorithm for Continually Running Fully Recurrent Neural Networks // Neural Computation. 1989. Vol. 1. No. 2. P. 270–280. DOI: 10.1162/neco.1989.1.2.270.

14. Allen-Zhu Z., Li Y. Physics of Language Models: Part 3.3, Knowledge Capacity Scaling Laws. 2024. DOI: 10.48550/arXiv.2404.05405.

15. Morris J.X., Sitawarin C., Guo C., et al. How Much Do Language Models Memorize? 2025. DOI: 10.48550/arXiv.2505.24832.

16. Loshchilov I., Hutter F. Decoupled Weight Decay Regularization. 2017. DOI: 10.48550/arXiv.1711.05101.

17. Child R., Gray S., Radford A., Sutskever I. Generating Long Sequences with Sparse Transformers. 2019. arXiv:1904.10509.

18. Katharopoulos A., Vyas A., Pappas N., Fleuret F. Transformers Are RNNs: Fast Autoregressive Transformers with Linear Attention // Proceedings of the 37th International Conference on Machine Learning. PMLR. 2020. Vol. 119. P. 5156–5165.

19. Gilmer J., Schoenholz S.S., Riley P.F., Vinyals O., Dahl G.E. Neural Message Passing for Quantum Chemistry // Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning. PMLR. 2017. Vol. 70. P. 1263–1272.

20. Dao T., Gu A., Eichhorn M., Rudra A., Ré C. Learning Fast Algorithms for Linear Transforms Using Butterfly Factorizations // Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning. PMLR. 2019. Vol. 97. P. 1517–1527.

21. Belcak P., Wattenhofer R. Fast Feedforward Networks. 2023. arXiv:2308.14711.

22. Mahoney M. About the Test Data // Large Text Compression Benchmark. 2006. URL: https://www.mattmahoney.net/dc/textdata.html (дата обращения: 26.07.2026).

А.Ю. ДОРОГОВ
ПАО «Информационные телекоммуникационные технологии» («Интелтех»), Санкт-Петербург, a.dorogov@inteltech.ru
Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ», vaksa2006@yandex.ru

ОРТОГОНАЛЬНЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ БЫСТРОГО ОБУЧЕНИЯ

Ортогональные сети являются вариантом алгоритма быстрого преобразования Фурье (БПФ). Факторизованная форма быстрого ортогонального преобразования рассматривается как многослойная нейронная сеть, а вычисление коэффициентов базовых операций как обучение нейронных ядер сети. В статье описан способ обучения ортогональных нейронных сетей к сигнальным функциям на основе метода фрактальной фильтрации. Алгоритм обучения не имеет обратных связей по ошибке, является абсолютно сходящимся и время его выполнения сопоставимо с временем обработки данных в сети.

В статье показана возможность топологического расширения класса самоподобных нейронных сетей, позволяющая выполнить реализации произвольных одномерных и двумерных линейных преобразований, акцент сделан на построение ортогонального преобразования Карунена-Лоэва. Нейросетевая реализация преобразования позволяет организовать высокоскоростную конвейерную обработку на специализированных процессорах с параллельной архитектурой и таким образом снять ограничения по размерности при его использовании.

Ключевые слова: *ортогональная нейронная сеть, быстрое преобразование, БПФ, фрактальная фильтрация, цензурирование нулей.*

Введение

Для задач классификации и распознавания сигналов существенное значение имеют процедуры предварительной обработки, ориентированные на устранение избыточности и выделение информативных признаков. Использование ортогональных преобразований для этих целей позволяет представить информацию, содержащуюся в исходном сигнале в виде взаимно-независимых спектральных составляющих. Известно, что максимальное сокращение избыточности данных обеспечивается ортогональным

преобразованием Карунена-Лоэва, которое образуется собственными векторами ковариационной матрицы сигналов. Это преобразование не имеет быстрого алгоритма и не пригодно для обработки данных высокой размерности на последовательных процессорах. На практике, распространение получили быстрые ортогональные преобразования, классическим примером является быстрое преобразование Фурье (БПФ).

В какой-то мере используемое название «ортогональная нейронная сеть» [1, 2] является данью моде, ранее употреблялся термин «перестраиваемое быстрое ортогональное преобразование». Первые предложения по построению перестраиваемого ортогонального преобразования на основе быстрых алгоритмов подобных БПФ были высказаны Эндрюсом и Каспари [3] в 70-х годах прошлого века. А первые подходы к обучению подобных преобразований были развиты в работах А.И. Солодовникова и его группы [4] в восьмидесятых годах прошлого века. В то время подобный класс преобразований называли также приспособленными быстрыми преобразованиями. Предложенный в то время алгоритм обучения был основан на геометрической модели ортогонального ядра второго порядка (базовой операции типа «бабочка»), представленной в полярной системе координат. Алгоритм позволял приспособить преобразование к одной опорной функции, отсюда и возникло название «приспособленные быстрые преобразования».

На рис. 1 представлен граф быстрого преобразования Фурье размерности 8 с топологией Кули-Тьюки «с прореживанием по времени». В каждом слое выделены четыре базовых операции типа «бабочка».

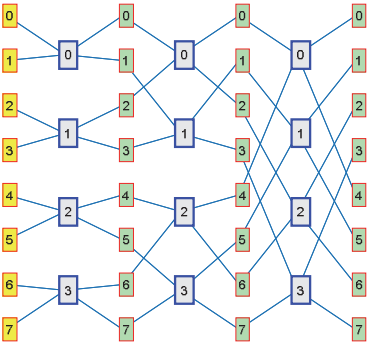


Рис. 1. Граф быстрого преобразования Фурье в топологии Кули-Тьюки «с прореживанием по времени» с выделением базовых операций

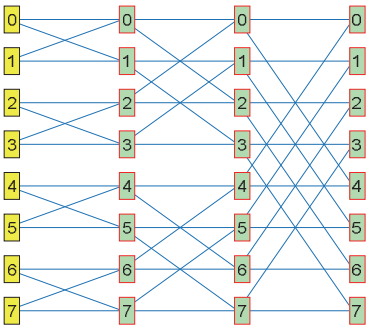


Рис. 2. Граф быстрого преобразования Фурье в топологии Кули-Тьюки «с прореживанием по времени» в компактной форме

Для преобразования Фурье параметры базовых операций полностью определены, однако, если полагать, что их параметры можно изменять и настраивать, то мы приходим к варианту быстрых нейронных сетей (БНС) [5]. Базовые операции далее будем называть нейронными ядрами. Для ортогональных нейронных сетей нейронные ядра представляются ортогональными матрицами малой размерности. Часто для представления графа быстрого алгоритма используется более компактная форма без выделения базовых операций (рис. 2). В этом представлении каждая дуга имеет определённый вес, соответствующий значению элемента базовой операции.

Быстрые нейронные сети это линейные преобразования, в которых число слоёв и топология межслойных связей определяется правилом построения быстрых алгоритмов, а коэффициенты преобразования настраиваются, т.е. существует процедура обучения. Автором было показано [5], что структура графов быстрых алгоритмов является самоподобной. Таким же свойством обладают фракталы. Это позволило разработать особые алгоритмы обучения на основе методов фрактальной фильтрации [5].

В [6] показано, что для самоподобных нейронных сетей элементы матрицы быстрого преобразования могут быть выражены через произведения элементов нейронных ядер:

$$h(U,V) = w_{z^{n-1}}^{n-1}\left(u_{n-1}, v_{n-1}\right) w_{z^{n-2}}^{n-2}\left(u_{n-2}, v_{n-2}\right) \cdots w_{z^0}^{0}\left(u_0, v_0\right), \qquad (1)$$

где U,V – номер строки и номер столбца матрицы быстрого преобразования, $w_{z^m}^{m}\left(u_m, v_m\right)$ – элементы базовой операции с номером z^m в слое m, (где $m = 0 \cdots n-1$). Число слоёв определяется мультипликативным разложением значения размерности преобразования $N = p_{n-1} \ldots p_1 p_0$, а множители p_m – определяют размерности нейронных ядер по слоям. Топологическая модель для схемы Кули-Тьюки с прореживанием по времени имеет вид:

$$\begin{aligned} U^m &= \left\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}u_m v_{m-1}v_{m-2}\ldots v_1 v_0 \right\rangle, \\ V^m &= \left\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}v_m v_{m-1}v_{m-2}\ldots v_1 v_0 \right\rangle, \\ z^m &= \left\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}v_{m-1}v_{m-2}\ldots v_1 v_0 \right\rangle. \end{aligned} \qquad (2)$$

Здесь индекс $m = 0,1,\cdots,n-1$ – означает номер нейронного слоя (для быстрых преобразований, отсчёт индексов и дискретных переменных принято вести с нуля), $U^m = 0 \cdots \left(N-1\right)$ – номер рецептора для слоя m,

$V^m = 0\cdots(N-1)$ – номер аксона для слоя m, z^m – номер нейронного ядра для слоя m, $u_m = 0\cdots(p_m - 1)$ – локальный номер рецептора для ядер слоя m, $v_m = 0\cdots(1-p_m)$ – локальный номер аксона для ядер слоя m. Числа p_i являются множителями в мультипликативной композиции $N = p_0 p_1 \cdots p_{n-1}$. Угловые скобки выделяют кортеж, представляющий число в многоосновной системе счисления.

Обучение ортогональных нейронных сетей

Определяющее значение для построения алгоритма обучения БНС имело доказанное автором положение, что любая дискретная функция $f(U)$, заданная на интервале $N = p_{n-1}\ldots p_1 p_0$ может быть представлена в виде произведения образующих функций [7]:

$$f(U) = \varphi_{i^0}(u_0)\varphi_{i^1}(u_1)\ldots\varphi_{i^{n-1}}(u_{n-1}). \tag{3}$$

Правило выбора образующих функций для каждого шага мультипликативного разложения подчиним топологической модели (2), положив $i^m = \langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}\rangle$. Для нахождения мультипликативного разложения (3) введём последовательность вспомогательных функций, определив их рекуррентно следующим образом:

$$\begin{aligned}
&f(U) = f_0\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_0\rangle,\\
&f_0\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_0\rangle = f_1\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_1\rangle\varphi_{i^0}(u_0),\\
&f_1\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_1\rangle = f_2\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_2\rangle\varphi_{i^1}(u_1),\\
&\vdots\\
&f_{n-2}\langle u_{n-1}u_{n-2}\rangle = f_{n-1}\langle u_{n-1}\rangle\varphi_{i^{n-2}}(u_{n-2}),\\
&f_{n-1}\langle u_{n-1}\rangle = f_n\varphi_{i^{n-1}}(u_{n-1}).
\end{aligned} \tag{4}$$

из этих соотношений непосредственно следует:

$$\varphi_{i^m}(u_m) = \frac{f_m\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_m\rangle}{f_{m+1}\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}\rangle}, \qquad m = 0,1,\ldots,n-1. \tag{5}$$

Правило построения вспомогательных функций, будет описано в следующем разделе, а сейчас будем полагать, что эти функции известны и множители в разложении (3) определены. Рассмотрим алгоритм обучения

быстрой ортогональной нейронной сети к одной функции $f(U)$, т.е. построим приспособленное преобразование.

Определение. Ортогональное преобразование, заданное матрицей $\|h(U,V)\|$, приспособлено к функции $f(U)$ по столбцу D, если выполнены условия:

$$\begin{cases} \sum\limits_{U} h(U,V) f(U) = 1 \quad при \quad V = D, \\ \sum\limits_{U} h(U,V) f(U) = 0 \quad при \quad V \neq D. \end{cases} \tag{6}$$

Предполагается, что опорная функция нормирована по энергии так, что: $\sum\limits_{U} f^2(U) = 1$. Подставив в левую часть (6) выражения (1) и (3) после преобразований получим:

$$\sum_{U} h(U,V) f(U) = \sum_{u_0} w_{z^0}(u_0, v_0) \varphi_{i^0}(u_0) \sum_{u_1} w_{z^1}(u_1, v_1) \varphi_{i^1}(u_1) \cdots$$
$$\cdots \sum_{u_{\kappa-1}} w_{z^{n-1}}(u_{n-1}, v_{n-1}) \varphi_{i^{n-1}}(u_{n-1}).$$

Из данного выражения, следует, что приспособленность спектрального преобразования обеспечивается, когда ядра любого слоя приспособлены к соответствующим компонентам мультипликативного разложения опорной функции:

$$\begin{cases} \sum\limits_{u_m} w_{z^m}(u_m, v_m) \varphi_{i^m}(u_m) = 1 \quad при \quad v_m = d_m, \quad z^m \cong i^m, \\ \sum\limits_{u_m} w_{z^m}(u_m, v_m) \varphi_{i^m}(u_m) = 0 \quad при \quad v_m \neq d_m, \end{cases} \tag{7}$$

где $D = \langle d_{n-1} d_{n-2} \ldots d_1 d_0 \rangle$ – номер столбца «точки привязки». Таким образом, задача настройки быстрого приспособленного спектрального преобразования сводится к построению приспособленных ортогональных ядер, для которых

$$w_{z^m}(u_m, d_m) = \varphi_{i^m}(u_m), \tag{8}$$

где $z^m = \langle u_{n-1} u_{n-2} \ldots u_{m+1} d_{m-1} d_{m-2} \ldots d_1 d_0 \rangle$. В общем случае для построения ортогональных ядер произвольной размерности следует использовать про-

цедуру ортогонализации Грамма-Шмидта [8]. Заметим, что условие приспособленности должно быть выполнено для ядер с номерами $z^m \cong i^m$, где символ «$\cong$» означает взаимно-однозначное соответствие, но $z^m = \langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}v_{m-1}v_{m-2}\ldots v_1v_0\rangle$, а $i^m = \langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}\rangle$, т.е. такое соответствие возможно только на части ядер. Остальные ортогональные ядра могут быть произвольными. На рис. 3 показан пример факторизованной формы быстрого приспособленного преобразования в топологии (2). Единицами отмечены настраиваемые параметры, а «звёздочками» − элементы свободных ортогональных ядер. Для нулевого слоя $z^0 = i^0$, т.е. все ядра этого слоя должны настраиваться, отсюда следует, что быстрое преобразование может быть приспособлено только к одной произвольной функции. Для того чтобы преобразование было ортогональным, достаточно заполнить свободные ядра любыми ортогональными матрицами. Например, для преобразования, показанного на рис. 3 свободные ядра можно заполнить единичными матрицами вида: $W = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, либо повторить ядра, уже найденные для текущего слоя.

			v_2	0	0	0	0	1	1	1	1	0	0	0	0	1	1	1	1	0	0	0	0	1	1	1	1
			v_1	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1
			v_0	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1
u_2	u_1	u_0																									
0	0	0	1	1								1		1						1				1			
0	0	1	1	1									*		*						*				*		
0	1	0			1	1						1		1								*				*	
0	1	1			1	1							*		*								*				*
1	0	0					1	1								1		1		1				1			
1	0	1					1	1									*		*		*				*		
1	1	0							1	1						1		1				*				*	
1	1	1							1	1							*		*				*				*

Рис. 3. Свободные параметры быстрого ортогонального преобразования, приспособленного к одной функции

На рис. 4 показаны функции-столбцы матрицы быстрого преобразования приспособленного, функции синуса, где свободные ядра в топологической структуре (рис.3) заполнены единичными матрицами.

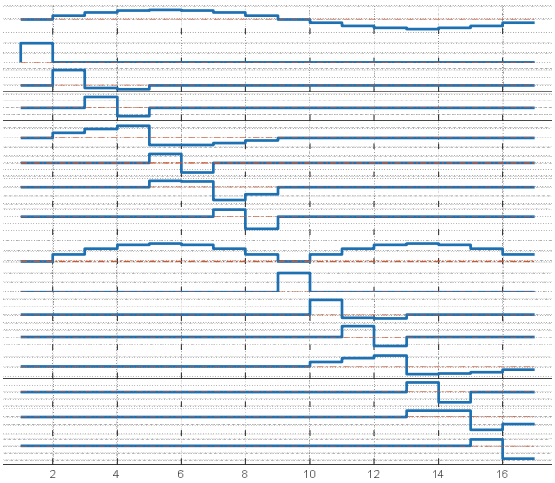


Рис. 4. Функции-столбцы быстрого ортогонального преобразования, приспособленного к функции синуса в точке привязке $D = 0$

Далее в статье будет показано, как можно построить факторизованное преобразование, приспособленное к нескольким произвольным функциям.

Фрактальная фильтрация

В обобщённом представлении фильтрация это операция в пространстве сигналов, реализующая проекцию сигнала в пространство сигналов меньшей размерности. Цель фрактальной фильтрации заключается в том, чтобы выявить пространственно-распределённые свойства изучаемого объекта в кратных временных масштабах.

Рассмотрим дискретный фрактальный фильтр. Пусть сигнал определён функцией $f(U)$, заданной на дискретном интервале длиной $N = p_{n-1} \dots p_1 p_0$. Представим аргумент U функции в позиционной многоосновной системе счисления с основаниями $p_0, p_1, \dots, p_{n-1}$. Формулы перехода к поразрядному представлению, как известно, имеют вид:

$$U = \langle u_{n-1} u_{n-2} \dots u_0 \rangle = u_{n-1} p_{n-2} p_{n-3} \dots p_0 + u_{n-2} p_{n-3} p_{n-4} \dots p_0 + \dots + u_1 p_0 + u_0,$$

где $u_i \in [0,1,\ldots,p_i-1]$ – разрядные переменные. В результате данного перехода сигнал представляется как многомерная функция $f\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_0\rangle$. Каждый аргумент функции определяет некоторый масштабный срез сигнала.

Зафиксируем все аргументы функции кроме u_m. Варьируя свободный аргумент u_m, получим выборку Q_m (с числом элементов p_m, которое назовём базой фильтра). Фрактальным фильтром масштабного уровня m будем называть произвольный функционал $F(Q_m)$, определённый на выборке Q_m. Операцию фрактальной фильтрации можно записать в виде:

$$f_{out}\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}u_{m-1}\ldots u_0\rangle = \underset{u_m}{F}\left(f_{inp}\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_0\rangle\right).$$

Наиболее простым вариантом является линейный фильтр вычисления среднего по выборке. Здесь значение m определяет масштабный уровень фильтра. Для фильтра с масштабным уровнем 0 определение фильтра примет вид:

$$f_{out}\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_2u_1\rangle = \frac{1}{p_0}\sum_{u_0} f_{inp}\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_2u_1u_0\rangle.$$

Возвращаясь к предыдущему разделу, определим вспомогательные функции выражения (4) правилом:

$$f_1\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_1\rangle = \underset{u_0}{F}\left(f_0\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_1u_0\rangle\right),$$

$$f_2\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_2\rangle = \underset{u_1}{F}\left(norm\left(\varphi_{i^0}(u_0)\right)f_1\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_2u_1\rangle\right),$$

$$\vdots$$

$$f_m\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_m\rangle = \underset{u_{m-1}}{F}\left(norm\left(\varphi_{i^{m-2}}(u_{m-2})\right)f_{m-1}\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_mu_{m-1}\rangle\right), \quad m>1.$$

Здесь $i^m = \langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}\rangle$, а нормы образующих функций вычисляются как $norm\left(\varphi(u)\right) = \sqrt{\sum_u \varphi^2(u)}$. Нетрудно заметить, что вспомогательные функции в выражении (4) могут быть, определены цепочкой фрактальных фильтров показанной на рис. 5.

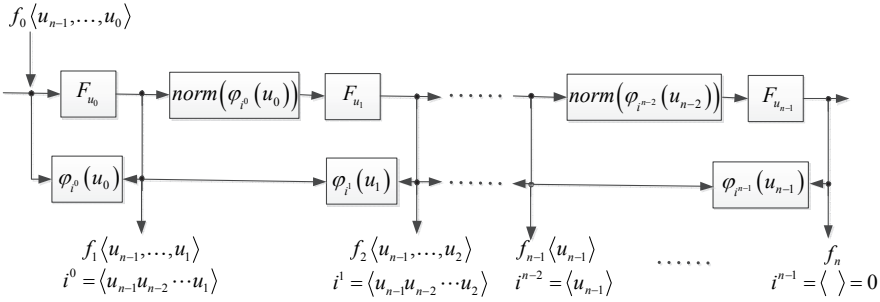


Рис. 5. Цепочка фрактальных фильтров

Выходом цепочки фильтров является число f_n, корректирующее последнею образующую функцию $\varphi_{i^{n-1}}(u_{n-1})$. Необходимость в множителе $norm\left(\varphi_{i^{m-2}}(u_{m-2})\right)$, под знаком фрактального фильтра масштабного уровня $m-1$, обусловлена зависимостью построенного набора образующих функций $\varphi_{i^{m-2}}(u_{m-2})$ от разрядной переменной u_{m-1}, поскольку функции набора индексируются индексом $i^{m-2}=\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m-1}\rangle$, явно зависящем от разрядной переменной u_{m-1}.

Нормирующий фильтр с цензурированием нулей

Схема последовательной фрактальной фильтрация, реализует принцип иерархической кратно-масштабной обработки данных. Рассмотренный алгоритм формирования вспомогательных и образующих функций, хорошо поясняет принцип мультипликативного разложения функций, но должен быть доработан при практической реализации по следующим причинам.

Во-первых, необходимо при выборе образующих функций обеспечить единичную норму для сигнальной функции $f(U)$. Из (3) следует:

$$\sum_U f^2(U)=\sum_{u_{n-1},u_{n-2},\ldots,u_0} f_0\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_0\rangle=$$

$$=\sum_{u_{n-1},u_{n-2},\ldots,u_0}\left(\varphi_{i^0}(u_0)\varphi_{i^1}(u_1)\ldots\varphi_{i^{n-2}}(u_{n-2})\varphi_{i^{n-1}}(u_{n-1})\right)^2=$$

$$=\sum_{u_0}\left(\varphi_{i^0}(u_0)\right)^2\sum_{u_1}\left(\varphi_{i^1}(u_1)\right)^2\ldots\sum_{u_{n-2}}\left(\varphi_{i^{n-2}}(u_{n-2})\right)^2\sum_{u_{n-1}}\left(\varphi_{i^{n-1}}(u_{n-1})\right)^2.$$

Таким образом, норма сигнальной функции $f(U)$ равна произведению норм образующих функций. В частности, если нормы образующих функций единичны, то и норма сигнальной функции также будет единична. Поэтому алгоритм мультипликативной декомпозиции должен предусматривать нормирование образующих функций.

Второе обстоятельство связано с формулой вычисления (5) для значений образующих функций. Может оказаться, что для шага m при значениях разрядных переменных $\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}\rangle$ знаменатель $f_{m+1}\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}\rangle$ в этом выражении равен нулю, тогда вычисление значения $\varphi_{i^m}(u_m)$ на этом шаге невыполнимо. Для того чтобы обойти эту ситуацию воспользуемся следующим приёмом, положим функцию знаменателя при всех значениях аргументов тождественно равной единице $f_{m+1}\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}\rangle \equiv 1$, тогда $\varphi_{i^m}(u_m) = f_m\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_m\rangle$ для $i^m = \langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}\rangle$, и далее

$$f(U) = \varphi_{i^0}(u_0)\varphi_{i^1}(u_1)\ldots\varphi_{i^{m-1}}(u_{m-1}) f_m\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_m\rangle =$$
$$= \varphi_{i^0}(u_0)\varphi_{i^1}(u_1)\ldots\varphi_{i^{m-1}}(u_{m-1})\varphi_{i^m}(u_m).$$

Последнее выражение корректно и отвечает итерационной процедуре (4). Продолжим процедуру последовательной фрактальной фильтрации используя, например, фильтр среднего, в результате на следующем шаге получим:

$$f_{m+2}\langle u_{n-1}u_{n-2}\cdots u_{m+2}\rangle = \frac{1}{p_{m+1}}\sum_{u_{m+1}} f_{m+1}\langle u_{n-1}u_{n-2}\cdots u_{m+1}\rangle = \frac{1}{p_{m+1}}\sum_{u_{m+1}} 1 = 1.$$

$$\varphi_{i^{m+1}}(u_{m+1}) = \frac{f_{m+1}\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}\rangle}{f_{m+2}\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+2}\rangle} = 1.$$

Построенная образующая функция $\varphi_{i^{m+1}}(u_{m+1}) \equiv 1_{i^{m+1}}$ тождественно равна единице при всех значениях аргумента u_{m+1} и набора индексов i_{m+1}. Для всех последующих шагов ситуация будет повторяться, в итоге после завершения итерационной процедуры мультипликативное представление функции будет иметь вид:

$$f(U) = \varphi_{i^0}(u_0)\varphi_{i^1}(u_1)\ldots\varphi_{i^{m-1}}(u_{m-1})\varphi_{i^m}(u_m)1_{i^{m+1}}1_{i^{m+2}}\cdots 1_{i^{n-1}}.$$

В рабочей версии алгоритма образующие функции дополнительно приводятся к единичной норме. Менее очевидно, что в алгоритме последовательной фильтрации необходимо также проверять на нуль значения числителя. Если на шаге m для всех значений разрядной переменной u_m числитель $f_m\langle u_{n-1}u_{n-2}\cdots u_m\rangle$ в выражении (4) равен нулю, то на следующем шаге получим:

$$f_{m+1}\langle u_{n-1}u_{n-2}\cdots u_{m+1}\rangle=\frac{1}{p_m}\sum_{u_m}f_m\langle u_{n-1}u_{n-2}\cdots u_m\rangle=\frac{1}{p_m}\sum_{u_m}0=0.$$

В рекуррентной схеме (4) в этом случае будем иметь строку:

$$0=f_m\langle u_{n-1}u_{n-2}\cdots u_m\rangle=f_{m+1}\langle u_{n-1}u_{n-2}\cdots u_{m+1}\rangle\varphi_{i^m}(u_m),$$

в которой при значениях аргументов $\langle u_{n-1}u_{n-2}\cdots u_{m+1}\rangle$ и для всех значений u_m, вспомогательные функции $f_{m+1}\langle u_{n-1}u_{n-2}\cdots u_{m+1}\rangle$ и $f_m\langle u_{n-1}u_{n-2}\cdots u_{m+1}u_m\rangle$ равны нулю. Отсюда следует, что образующая вектор-функция $\varphi_{i^m}(u_m)$ может быть выбрана произвольной, но она не может быть тождественно нулевой, поскольку должна входить как вектор-столбец в ортогональное ядро. В этой ситуации можно взять в качестве $\varphi_{i^m}(u_m)$ любой ненулевой вектор размерности p_m и пронормировать его к единичной энергии. Наиболее простой вариант выбрать вектор с одной ненулевой координатой, например, $\varphi_{i^m}(u_m)=(1\,0\,0\cdots0)$, после нормировки получим:

$$\bar{\varphi}_{i^m}(u_m)=\left(\varphi_{i^m}(u_m)\right)/norm\left(\varphi_{i^m}(u_m)\right).$$

Выбор фрактального фильтра не критичен, результат будет аналогичным и для других типов фильтров. На рис. 6 представлен модифицированный алгоритм фрактального фильтра, обеспечивающего, цензурирование нулей, и нормировку при вычислении образующих функций.

Первый блок алгоритма выполняет обычную фрактальную фильтрацию, например с помощью фильтра среднего. На выходе фильтра получим вспомогательную функцию $f_{m+1}\langle u_{n-1}u_{n-2}\ldots u_{m+1}\rangle$, которая является знаменателем выражения (5). Логический блок 1 алгоритма выполняет контроль значений числителя выражения (5). Если максимум модулей по всем значениям u_m равен нулю тогда и все значения функции числителя также нулевые. Для этой ветви алгоритма выход фрактального фильтра средних

также будет нулевым. В этом случае образующая функция выбирается в виде $\varphi_{i^m} = (1\,0\,0\ldots0)$. Другие варианты также приемлемы, образующая функция должна иметь хотя бы одно не нулевое значение.

Логический блок 2 выполняет контроль знаменателя выражения (5). Если знаменатель не равен нулю, то для вычислений значений образующей функции используется выражение (5), а если равен нулю, то образующая функция устанавливается равной числителю выражения (5), а знаменатель устанавливается равным единице, который передаётся на выход фильтра, где домножается на норму образующей функции.

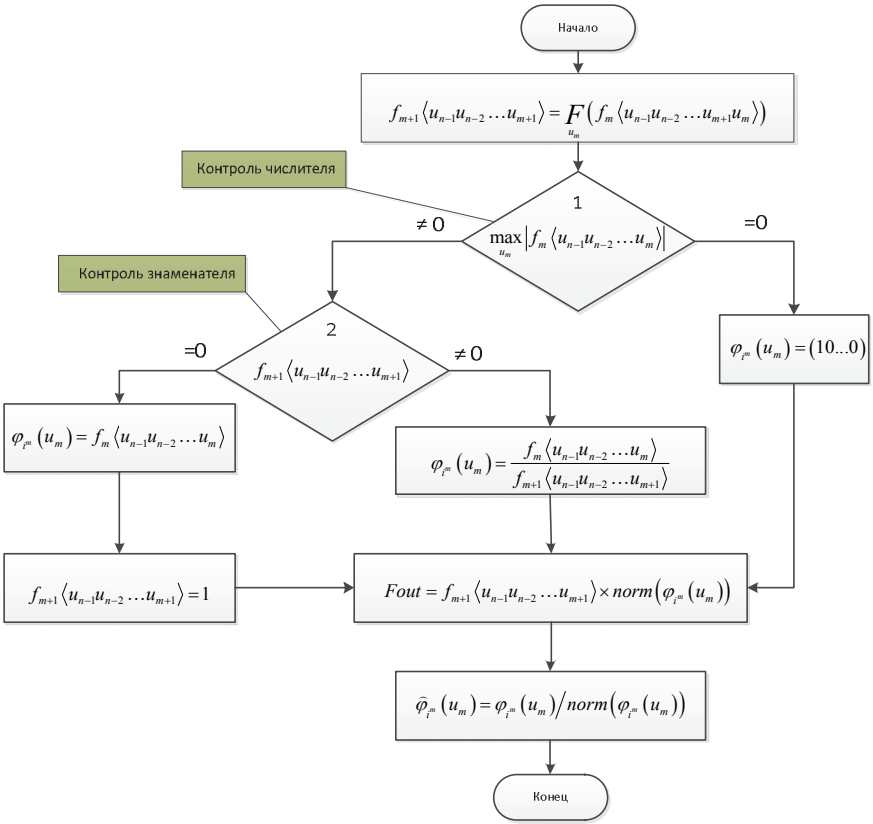


Рис. 6. Алгоритм цензурирования нулей

Заключительный блок алгоритма выполняет нормирование образующей функции. Приведённый алгоритм заменяет фрактальные фильтры в цепочке, представленной на рис. 4.

Ортогональные нейронные сети с дополнительными плоскостями

Как уже отмечалось выше, максимальное сокращение избыточности данных обеспечивается ортогональным преобразованием Карунена-Лоэва. Это преобразование впервые было предложено Хотеллингом [1] позже переоткрыто Каруненом и Лоэвом [2, 3]. Однако практическое использование данного преобразования на процессорах с последовательной архитектурой сопряжено со значительными вычислительными затратами, которые квадратично растут с увеличением размерности преобразования. В этом разделе будет показано, что отсутствие быстрого алгоритма не препятствует процедуре факторизации преобразования, а значит его эффективного вычисления на процессорах с параллельной архитектурой.

Рассмотрим топологическую модель быстрой нейронной сети в обобщённом варианте с различающимися размерностями по входу и выходу. В этом случае основания разрядных переменных u_m, v_m задаются соответствиями:

$$\begin{pmatrix} u_0 & u_1 & \cdots & u_{n-2} & u_{n-1} \\ p_0 & p_1 & \cdots & p_{n-2} & p_{n-1} \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} v_0 & v_1 & \cdots & v_{n-2} & v_{n-1} \\ g_0 & g_1 & \cdots & g_{n-2} & g_{n-1} \end{pmatrix}.$$

Размерности быстрой нейронной сети по входу и выходу вычисляются через произведения оснований разрядных переменных:

$$N = p_{n-1} \cdots p_1 p_0, \qquad M = g_{n-1} \cdots g_1 g_0.$$

Следуя работе [5] нарастим топологическую модель Кули-Тьюки (2) дополнительными плоскостями нейронных ядер, номера которых определим переменной π_m. Новая топологическая модель в этом случае будет описываться набором кортежей:

$$\begin{aligned} U^m &= \langle u_{n-1} u_{n-2} \cdots u_{m+1} u_m v_{m-1} v_{m-2} \cdots v_1 v_0 \rangle, \\ V^m &= \langle u_{n-1} u_{n-2} \cdots u_{m+1} v_m v_{m-1} v_{m-2} \cdots v_1 v_0 \rangle, \\ z^m &= \langle u_{n-1} u_{n-2} \cdots u_{m+1} v_{m-1} v_{m-2} \cdots v_1 v_0 \rangle, \\ \pi_m &= \langle v_{n-1} v_{n-2} \cdots v_{m+2} v_{m+1} \rangle. \end{aligned} \tag{9}$$

Максимальное количество дополнительных плоскостей появится в нулевом слое. Номер плоскости в нулевом слое будет определяться кортежем $\pi_0 = \langle v_{n-1} v_{n-2} \cdots v_2 v_1 \rangle$. Плоскость с номером $\pi_0 = 0$ будем считать плоскостью исходной базовой топологической структуры. Число плоскостей в нулевом слое будет равно произведению оснований: $g_{n-1} g_{n-2} \cdots g_2 g_1$. По мере движения к выходному слою число дополнительных плоскостей будет уменьшаться и для последнего слоя $\pi_{n-1} = \langle\ \rangle$, т.е. их не будет совсем, останется только одна плоскость базовой топологии. Таким образом, в новой топологии плоскость последнего слоя останется прежней, а в младших слоях появятся дополнительные плоскости. На рис. 7 показана новая топология, построенная на базе трёхслойной сети с основанием 2 в топологии Кули-Тюки «с прореживанием по времени». Это представление раскрывает принцип организации сети с дополнительными плоскостями, а на рис. 8 показан её образ в машино-сконструированной форме.

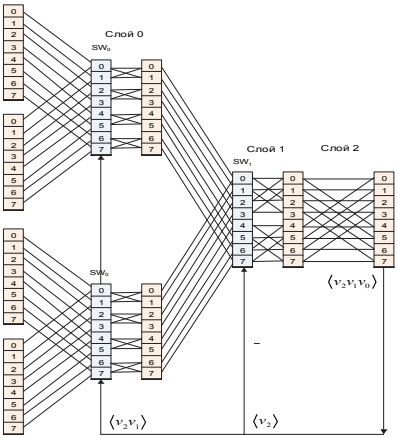


Рис. 7. Топология самоподобной нейронной сети с дополнительными плоскостям

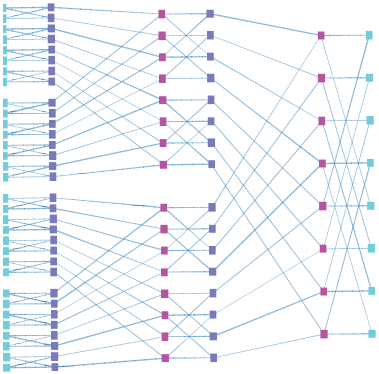


Рис. 8. Топология самоподобной нейронной сети с дополнительными плоскостям в машинно-сконструированной форме

В сети на рис. 7 условно показаны коммутаторы (SW), которые служат для пояснения принципа работы сети. Коммутаторы управляются разрядными переменными точек выходной плоскости. Фактически коммутаторов нет, они реализуются в составе алгоритма и не препятствуют параллельной обработки входных данных. В контексте спектрального преобразования

точки выходной плоскости точки ассоциируются со спектральными коэффициентами, поэтому привязка спектрального коэффициента к координатам выходной плоскости предопределяет выбор дополнительных плоскостей, которые используются для обработки входных образов. При построении спектрального анализатора все векторные входы параллельно объединяются.

Поскольку правило порождения новых плоскостей не противоречит базовой топологической модели, то для настройки ядер преобразования к эталону можно использовать выражение (8), расширив его аргументом π_m для дополнительных плоскостей:

$$w_{z^m}^{m}\left\langle \pi_m \right\rangle\left(u_m, d_m\right) = \phi_{i^m}^{k}\left(u_m\right),$$

здесь k – номер эталонной функции, $D = \left\langle d_{n-1} d_{n-2} \ldots d_1 d_0 \right\rangle$, точка привязки, $z^m = \left\langle u_{n-1} u_{n-2} \ldots u_{m+1} d_{m-1} d_{m-2} \ldots d_1 d_0 \right\rangle$ номер настраиваемых ядер по слоям, $\pi_m = \left\langle d_{n-1} d_{n-2} \cdots d_{m-1} \right\rangle$ – номер плоскости размещения ядер. Индекс k в правой части нумерует точку привязки. Для $m = 0$ имеем $z^0 = i^0 = \left\langle u_{n-1} u_{n-2} \cdots u_1 \right\rangle$, а варьируемыми переменными в левой части являются номер плоскости $\pi_0 = \left\langle d_{n-1} d_{n-2} \cdots d_1 \right\rangle$ и разряд d_0. Вместе они покрывают весь диапазон координат выходной плоскости. Этому диапазону отвечают возможные значения индекса k в правой части, отсюда следует, что каждая точка выходной плоскости может быть связана с собственной опорной функцией. Т.е. построенная сеть обладает максимально возможным числом точек привязки, покрывающих всю выходную плоскость и, таким образом может быть использована для реализации произвольного линейного преобразования размерности $N \times M$. В частности, при реализации ортогонального преобразования Карунена-Лоэва для которого выполняется $N = M$.

Заключение

Предложенный метод обучения быстрых ортогональных нейронных сетей позволяет точно настроиться на сигнальную функцию за конечное число шагов. Проблемы сходимости здесь не существует, алгоритм абсолютно сходится, но существует необходимость контроля нулей в базовом выражении алгоритма обучения. Рассмотренный способ цензурирования нулей решает эту задачу. Данный способ, может быть, в равной мере использован и для не ортогональных вариантов БНС. Для построения нейронной сети может быть использована любая топологическая модель из класса

самоподобных нейронных сетей. Переход от одной модели к другой реализуется через числовые перестановки терминальных полей.

В статье показано, что топология одномерных и двумерных БНС легко расширяется дополнительными плоскостями, при этом число реализуемых опорных функций кардинально возрастает и покрывает все элементы выходной плоскости. Расширение топологии не нарушает принципа построения обучающего алгоритма. Полученные результаты позволяют построить факторизованное представление для любого линейного преобразования, в том числе и для ортогонального преобразования Карунена-Лоэва. Вычислительный эффект от факторизации достигается при использовании специализированных процессоров с распараллеливанием вычислительных операций. Предложенные архитектура реализуют сети с глубокой степенью обучения. Можно показать, что они сегментируются в лес независимых пирамидальных сетей [5]. Это порождает уникальное качество – возможность дообучения сети к новым образам без изменения или потери ранее накопленных знаний. В режиме обучения сети могут работать в системах реального времени, поскольку время обучения не превышает времени обработки данных в сети.

Список литературы

1. Bartłomiej Stasiak and Mykhaylo Yatsymirsky Fast Orthogonal Neural Networks Lecture Notes in Computer Science, 2006, Volume 4029/2006. 142–149.

2. Дорогов А.Ю Реализация спектральных преобразований в классе быстрых нейронных сетей // Программирование № 4. 2003. С.13–26.

3. Andrews H.C., Caspari K.L. A General Techniques for Spectral Analysis // IEEE. Tr. Computer. 1970. Vol C –19. – Jan. No 1. P.16–25.

4. Солодовников А.И., Спиваковский А.М. Основы теории и методы спектральной обработки информации. Л., 1986. 272 с.

5. Дорогов А.Ю. Самоподобные нейронные сети быстрого обучения. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2024. 188 с. www.dorogov.su.

6. Дорогов А.Ю. Теория и проектирование быстрых перестраиваемых преобразований и слабосвязанных нейронных сетей. СПб.: «Политехника», 2014. 328 с.

7. Дорогов А.Ю. Методы настройки быстрых перестраиваемых преобразований // Нейрокомпьютеры: разработка и применение. 2004. № 7–8. С. 17–32.

8. Белман Р. Введение в теорию матриц. М.: Наука, 1976. 352 с.

9. Hotelling H. Analysis of a complex of statistical variables into principal components. Journal of Educational Psychology. 1933. 24. 417–441 and 498–520.

10. K. Karhunen, Kari, Uber lineare Methoden in der Wahrscheinlichkeitsrechnung, Ann. Acad. Sci. Fennicae. Ser. A. I. Math.-Phys. 1947. No. 37. 1–79.

11. Лоев М. Теория вероятностей. М.: Иностранная литература, 1962.

12. Дорогов А.Ю. Быстрые нейронные сети глубокого обучения // III Международная научная конференция по проблемам управления в технических системах (CTS'2019). Сборник докладов. Санкт-Петербург. 30 октября – 1 ноября 2019 г. СПб.: СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2019. С. 275–280.

Д.П. ДРОЗДОВ, К.С. ЯКОВЛЕВ
Санкт-Петербургский государственный университет
d.drozdov@spbu.ru

МЕХАНИЗМ САМОВНИМАНИЯ ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ ЭВРИСТИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ПОИСКА НА ГРАФАХ КЭЛИ

Исследуется применение механизма самовнимания для построения нейросетевой эвристической функции в задаче поиска кратчайшего пути на графах Кэли на примере кубиков Рубика 3 × 3 × 3 и 4 × 4 × 4. Предложена архитектура на основе многоголового внимания, улавливающая глобальные зависимости между элементами кубика. Предлагаемая обучаемая эвристика интегрирована с процедурой систематического поиска. По результатам экспериментальных исследований результирующий алгоритм превзошёл передовой метод на открытых наборах задач: доля решённых задач возросла с 0,95 до 0,98 для 3 × 3 × 3 и с 0,56 до 0,74 для 4 × 4 × 4.

Ключевые слова: *граф Кэли, кубик Рубика, самовнимание, нейросетевая эвристика, лучевой поиск, машинное обучение, случайные блуждания.*

Введение

Задача поиска кратчайшего пути на графах Кэли конечных групп – одна из центральных задач прикладной математики и информатики. Граф Кэли $Cay(G, S)$ строится по конечной группе G с симметричным порождающим множеством $S = S^{-1}$: вершины соответствуют элементам группы, а рёбра – умножению на генератор справа. Граф $|S|$-регулярен и вершинно транзитивен. В обобщённой постановке задача поиска кратчайшего пути на графе Кэли является NP-трудной [1].

Кубик Рубика $N \times N \times N$ – канонический пример задачи на графе Кэли: состояния образуют граф $Cay(G_n, S_n)$, где G_n – группа симметрий кубика, S_n – множество элементарных ходов. В метрике четвертьоборотов (QTM) каждый ход – поворот одного из $3N$ слоёв на 90°, $|S_n| = 6N$. Мощность группы растёт факториально: $|G_3| \approx 4{,}3 \times 10^{19}$, $|G_4| \approx 7{,}4 \times 10^{45}$. При таких размерах классические алгоритмы поиска (BFS, A*, IDA*) и системы компьютерной алгебры полностью непригодны: даже хранение таблицы состояний физически невозможно [2].

В связи с этими ограничениями в задаче поиска на графах Кэли широко применяются приближённые методы на основе нейросетевой эвристической функции – аппроксимации расстояния от текущего состояния до целевого, качество которой напрямую определяет эффективность поиска. Существующие подходы, такие как DeepCubeA [3] и EfficientCube [4], используют многослойный перцептрон (MLP), обрабатывающий плоский вектор цветов элементов кубика – фацетов и не учитывающий структурные зависимости между ними, что ограничивает качество получаемых оценок.

С другой стороны, механизм самовнимания (self-attention) [5], лежащий в основе трансформерных архитектур, позволяет каждому элементу входа взвешенно агрегировать информацию от всех остальных, явно моделируя зависимости между произвольными парами фацетов, включая фацеты разных граней. Гипотеза работы: такое представление даёт более информативную функцию оценки, чем MLP, и тем самым повышает эффективность поиска. Для проверки гипотезы предложенная эвристика интегрирована в лучевой поиск; результаты экспериментов подтверждают превосходство алгоритма над передовыми аналогами.

1. Обзор предметной области

Алгоритм на основе теории групп [6] (1981) строит убывающую цепочку подгрупп $G_0 \supset G_1 \supset G_2 \supset G_3 \supset \{e\}$ и последовательно переводит состояние кубика через них по предварительно вычисленным таблицам; двухфазный алгоритм 1992 года [7] сократил число фаз до двух, находя решения порядка 20 ходов. Оба метода требуют экспоненциально растущих с N таблиц и неприменимы при $N \geq 4$.

Эвристический поиск с IDA* с pattern databases – таблицами минимальных расстояний для подзадач (только углы или только рёбра) [8] – впервые дал оптимальные решения для случайных конфигураций $3 \times 3 \times 3$. Для кубика $4 \times 4 \times 4$ соответствующие базы требуют сотен гигабайт памяти даже для отдельных подзадач, что делает подход неприменимым при $N \geq 4$.

Среди нейросетевых эвристик для кубика Рубика наиболее известна DeepCubeA [3], в которой MLP обучается методом автодидактической итерации (ADI), а затем применяется для предсказания эвристик в алгоритме BWAS. Метод нашёл 60,3% путей оптимальной длины на тестовой выборке кубика $3 \times 3 \times 3$, однако требовал ~ 10 млрд обучающих примеров. В развивающей это направление работе EfficientCube [4] в которой ADI было заменено самообучением на случайных перемешиваниях; это позволило повысить долю решений оптимальной длины до 69,6 %. Оба метода используют MLP без учёта структуры фацетов.

В [9] ResMLP обучается на случайных блужданиях по графу Кэли для оценки диффузионного расстояния; многоагентный лучевой поиск на ансамбле сетей решил кубики 4 × 4 × 4, найдя 98,4 % путей оптимальной длины на тестовой выборке кубика 3 × 3 × 3. Вместе с тем архитектуры, явно моделирующие зависимости между элементами состояния, авторами не исследовались.

Механизм self-attention [5] успешно применяется для задач с комбинаторной структурой: маршрутизации [10], планирования [11], в игровых средах. Применительно к кубику Рубика каждый фацет можно рассматривать как токен, а внимание – явно моделировать, какие пары фацетов информативны для оценки расстояния до цели. Настоящая работа – одно из первых систематических исследований self-attention как нейросетевой эвристики для поиска на графах Кэли.

2. Постановка задачи

Граф Кэли $Cay(G, S) = (V, E)$ строится по конечной группе G с единицей e и симметричным порождающим множеством $S \subset G\backslash\{e\}$: $V = G$, $E = \{(g, g \cdot s) \mid g \in G, s \in S\}$. Путём из u в v называется последовательность $(g_0, g_1, \ldots, g_T)$ с $g_0 = u$, $g_T = v$, $g_{k+1} = g_k \cdot s_k$, $s_k \in S$; длина пути T является расстоянием $d(u, v)$. Диаметр $diam(G, S) = max_{u,v}\, d(u, v)$ – «число Бога»: наименьшее N_0 такое, что любое состояние решается не более чем за N_0 ходов.

Кубик $N \times N \times N$ имеет $6N^2$ фацетов. В метрике QTM каждый ход – поворот одного из $3N$ слоёв на 90°; $|S_n| = 6N$; $G_n = \langle S_n \rangle$. Состояние $g \in G_n$ кодируется вектором цветов фацетов $v(g) = (c_0, \ldots, c_{6n^2-1}) \in \{0, \ldots, 5\}^{6N^2}$ длиной 54 для $N = 3$ и 96 для $N = 4$. Применение хода s реализуется перестановкой координат: $v(g \cdot s) = v(g)[s^{-1}(0), \ldots, s^{-1}(6N^2 - 1)]$.

Таблица 1

Мощности групп кубика Рубика и диаметры графов Кэли (QTM)

N	$\lvert G_n \rvert$	Диаметр $diam(G_n, S_n)$
2	$\approx 3{,}7 \times 10^6$	14
3	$\approx 4{,}3 \times 10^{19}$	26
4	$\approx 7{,}4 \times 10^{45}$	Неизвестен

Задача: для произвольного $g_0 \in G_n$ найти путь $\pi *$ из g_0 до единицы e наименьшей длины. Задача NP-трудна [1]; при $N \geq 4$ точные методы физически неприменимы. Качество приближённого решения $\tilde{\pi}$ оценивается долей решённых задач $\rho = P[\tilde{\pi}$ найден за $I_{\max}$ итераций] и средней длиной $\bar{L} = E[|\tilde{\pi}|]$.

3. Методы

В предлагаемом подходе нейросетевая модель используется для аппроксимации функции расстояния до целевого состояния на графе Кэли. После обучения модель применяется в качестве эвристической функции ($h(g)$), оценивающей оставшуюся стоимость пути (cost-to-go) для текущего состояния (g). Полученная эвристика используется алгоритмом поиска для выбора наиболее перспективных направлений исследования пространства состояний.

Алгоритм поиска: Лучевой поиск (beam search) на каждом шаге формирует множество всех преемников текущего луча, оценивает их нейросетевой функцией $h(n)$ и сохраняет W наиболее перспективных состояний. При $W \to \infty$ алгоритм переходит в BFS; при $W = 1$ – в жадный поиск. Beam search менее чувствителен к локальным ошибкам эвристики, чем A*, благодаря одновременному рассмотрению нескольких траекторий, и принят в качестве единственного алгоритма поиска в данной работе. Параметр W варьируется в экспериментах.

Базовая архитектура: MLP. Многослойный перцептрон принимает плоский вектор $v(g)$ длиной $6N^2$ и предсказывает скалярную оценку расстояния до целевого состояния. Архитектура (~4 млн параметров) включает полносвязные слои с активациями ReLU, нормализацию BatchNorm и остаточные соединения; аналогична модели из [9]. MLP не учитывает никакой структурной информации о кубике: зависимости между фацетами могут быть извлечены только через веса слоёв.

Предлагаемая архитектура: Self-Attention (SA). Состояние кубика рассматривается как последовательность токенов: каждый фацет кодируется своим цветом $c \in 0, \ldots, 5$ и позицией $i \in 0, \ldots, 6N^2 - 1$. На входном слое каждый токен отображается в вектор размерности $d_{model} = 192$ через embedding-матрицу $E_{color} \in \mathbb{R}^{6\times 192}$ и позиционный embedding $E_{pos} \in \mathbb{R}^{6N^2\times 192}$, суммируемые поэлементно. Матрица E_{color} представляет собой обучаемую таблицу поиска: каждому из шести цветов сопоставляется отдельная обучаемая строка размерности 192. Позиционный embedding E_{pos} устроен аналогично и сопоставляет каждой из $6N^2$ позиций обучаемый вектор, кодирующий локализацию фацета на кубике, что позволяет различать одинаково

окрашенные фацеты в разных его частях. Оба embedding обучаются совместно с сетью, без заранее заданной (например, синусоидальной) схемы кодирования. Дополнительно к последовательности добавляется специальный агрегирующий токен CLS, представление которого на выходе последнего слоя используется как итоговая оценка расстояния. Схема архитектуры показана на рис. 1.

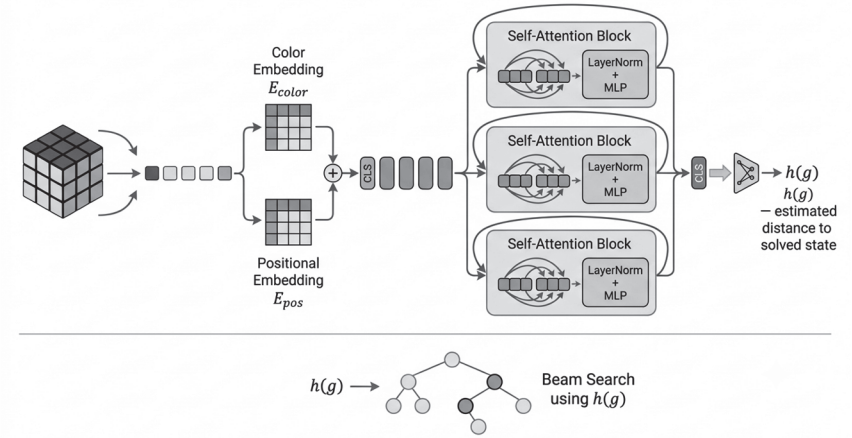


Рис. 1. Схема архитектуры Self-Attention для оценки состояния кубика Рубика

Блок self-attention формально описывается следующим образом. Пусть входная матрица $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$, $n = 6N^2 + 1$ (фацеты плюс CLS). Механизм реализован в многоголовом варианте (multi-head attention): для каждой из $H = 4$ независимых голов вычисляются проекции $Q = XW_Q$, $K = XW_K$, $V = XW_V$, где W_Q, W_K, $W_V \in R^{d \times (d/H)}$. Выход одной головы: $Attention(Q, K, V) = softmax(QK^T/\sqrt{(d/H)}) \cdot V$. Выходы всех H голов конкатенируются и проецируются обратно в пространство размерности d. Архитектура включает 3 последовательных блока self-attention с нормализацией LayerNorm и остаточными соединениями, за которыми следует позиционно-независимый MLP-слой. Итоговая оценка $h(g)$ – линейная проекция представления CLS-токена (~ 1 млн параметров).

Ключевое преимущество SA над MLP состоит в явном моделировании попарных зависимостей между фацетами: внимание позволяет сосредоточиться на информативных парах (например, угловых и рёберных кусочках,

связанных одним ходом). Веса внимания интерпретируемы: высокое значение α_{ij} означает, что при оценке состояния фацет i информативен в контексте фацета j.

Таблица 2

Сравниваемые архитектуры нейросетевой функции оценки

Архитектура	Параметры	Вход	Структура	Сложность
MLP	~4 млн	$6N^2$ скалярных	Полносвязная	$O(d^2 \cdot L)$
SA (наша)	~1 млн	$6N^2 + 1$ токенов	Мультигол. внимание	$O(n^2 \cdot d)$

Генерация обучающих данных: рассматривается генерация обучающих данных на основе случайных блужданий по графу: начиная из целевого состояния, генерируется $\lfloor 128 \cdot 10^6/T \rfloor$ траекторий глубины T ($T = 26$ для $3 \times 3 \times 3$, $T = 45$ для $4 \times 4 \times 4$). Повторные посещения запрещены – это гарантирует непротиворечивость разметки: каждому состоянию соответствует единственная метка. Обучение – 64 эпохи на фиксированном распределении.

4. Эксперименты

Эксперименты проводятся на международном бенчмарке Kaggle Santa 2023 [1], содержащем задачи поиска решений на графах Кэли, соответствующих кубикам Рубика $3 \times 3 \times 3$ и $4 \times 4 \times 4$ (82 и 43 задачи соответственно). Качество решений оценивается в метрике QTM при размерах генераторных множеств $|S_n| = 18$ и 24.

Во всех экспериментах используется единая вычислительная конфигурация: GPU NVIDIA A100 PCIe 40 GB и CPU AMD EPYC 7742 (64 cores), что обеспечивает сопоставимость полученных результатов.

4.1. Сравнение SA и MLP по качеству поиска

Основная серия экспериментов сравнивает SA и MLP при фиксированном датасете и одинаковой ширине луча W. Измеряются доля решённых задач ρ и средняя длина решения $\overline{L}$.

SA стабильно превосходит MLP по доле решённых задач при одинаковой ширине луча (табл. 3). Для кубика $3 \times 3 \times 3$ при $W = 128$ прирост составляет 3 п.п. (0,95 → 0,98); при $W = 1024$ обе архитектуры достигают 1,00, что го-

ворит о том, что при достаточной ширине луча SAпреимущество нивелируется. Наиболее выраженный эффект наблюдается для кубика 4 × 4 × 4, где пространство состояний на 26 порядков больше: при $W = 4096$ прирост составляет 2 п.п. (0,51 → 0,53), при $W = 8192$ – 18 п.п. (0,56 → 0,74). Это согласуется с гипотезой о том, что преимущества selfattention становятся заметнее по мере роста сложности пространства состояний и повышения требований к качеству эвристики. Кроме того, SA во всех конфигурациях демонстрирует меньшую среднюю длину найденных решений.

Таблица 3

Сравнение SA и MLP: доля решённых задач и средняя длина решения (датасет БД)

Кубик	Метод	W	Доля реш.	Ср. длина
3×3×3	MLP	128	0,95	29,5
3×3×3	SA	128	0,98	25,8
3×3×3	MLP	1024	1,00	24,0
3×3×3	SA	1024	1,00	22,2
4×4×4	MLP	4096	0,51	84,4
4×4×4	SA	4096	0,53	83,1
4×4×4	MLP	8192	0,56	78,0
4×4×4	SA	8192	0,74	71,7

Во всех экспериментах использовалась конфигурация SA-архитектуры с числом голов внимания $H = 4$, числом self-attention-блоков $L = 3$ и размерностью скрытого представления $d_{model} = 192$. Данные параметры были выбраны как обеспечивающие разумный компромисс между выразительной способностью модели и вычислительными затратами. Использование относительно компактной архитектуры особенно важно для лучевого поиска, где эвристическая функция вызывается многократно на каждом шаге алгоритма. Кроме того, квадратичная сложность self-attention по длине последовательности $O(n^2 \cdot d)$ приводит к быстрому росту времени инференса при увеличении размера кубика, поэтому дальнейшее увеличение размеров модели в данной работе не рассматривалось.

4.2. Сравнение времени инференса MLP и SA

Поскольку в лучевом поиске нейросетевая эвристика вызывается на каждом шаге поиска для всех W состояний луча, время одного вызова модели непосредственно определяет общее время решения задачи. В табл. 4

приведены среднее время решения одной задачи и среднее время одного вызова эвристики для MLP и SA на обоих кубиках.

Таблица 4

Сравнение времени инференса MLP и SA (датасет БД)

Кубик	**Метод**	***W***	**Время/задачу, с**	**Время/вызов, мс**	**SA/MLP**
3×3×3	MLP	128	4,1	1,4	–
3×3×3	SA	128	4,4	1,8	× 1,1
3×3×3	MLP	1024	4,6	1,5	–
3×3×3	SA	1024	5,4	2,0	× 1,2
4×4×4	MLP	4096	15	1,8	–
4×4×4	SA	4096	23	2,8	× 1,5
4×4×4	MLP	8192	60	2,0	–
4×4×4	SA	8192	200	3,9	× 3,3

SA демонстрирует более высокую вычислительную стоимость по сравнению с MLP (табл. 4). В проведённых экспериментах время одного вызова эвристики для SA оказывается примерно в 1,3–2,0 раза выше, чем для MLP. Причина заключается в квадратичной зависимости сложности self-attention от длины последовательности, $O(n^2 \cdot d)$, где $n = 6N^2 + 1$. При переходе от 3 × 3 × 3 к 4 × 4 × 4 рост времени инференса у SA оказывается более выраженным, чем у MLP, что указывает на потенциальные проблемы масштабирования при дальнейшем увеличении размера кубика.

Заключение

В работе исследовано применение механизма самовнимания для построения нейросетевой эвристической функции в задаче поиска на графах Кэли кубиков Рубика 3 × 3 × 3 и 4 × 4 × 4. SA-архитектура (~ 1 млн параметров), моделирующая попарные зависимости между элементами и гранями кубика, стабильно превосходит базовый MLP, использующийся в передовых современных решателях, по доле решённых задач: прирост составляет до 3 п.п. для 3 × 3 × 3 и до 18 п.п. для 4 × 4 × 4.

Установлены следующие ключевые результаты. Во-первых, SA стабильно превосходит MLP по доле решённых задач — в особенности для кубика 4 × 4 × 4, где более сложное пространство состояний лучше раскрывает преимущество явного моделирования зависимостей между фацетами. Во-вторых, квадратичная сложность вычисления весов внимания $O(n^2 \cdot d)$

делает SA значительно медленнее MLP при инференсе, что ограничивает его применимость при больших N.

Полученные результаты открывают несколько направлений дальнейших исследований. Главным ограничением является вычислительная стоимость полного механизма внимания. Перспективным направлением является применение разреженного внимания (sparse attention): вместо полной матрицы $O(n^2)$ вычислять веса лишь для структурно связанных пар фацетов (фацеты одной грани, смежных граней, фацеты одного кубика), что снизит сложность до $O(n \cdot k)$ при $k \ll n$. Другим подходом является линейное внимание (linear attention) с аппроксимацией ядра, снижающей сложность до $O(n \cdot d)$. Необходимо также исследовать масштабирование на кубики $N \geq 5$ и разработать стратегии совместного обучения SA эвристики и алгоритма поиска.

Список литературы

1. Even S., Goldreich O. The minimum-length generator sequence problem is NP-hard // Journal of Algorithms. 1981. Т. 2. № 3. С. 311–313.

2. Linton S. GAP: Groups, Algorithms, Programming // ACM Communications in Computer Algebra. 2007. Т. 41. № 3. С. 108–109.

3. Agostinelli F., McAleer S., Shmakov A., Baldi P. Solving the Rubik's Cube with deep reinforcement learning and search // Nature Machine Intelligence. 2019. Т. 1. № 8. С. 356–363.

4. Takano K. Self-Supervision is All You Need for Solving Rubik's Cube // Transactions on Machine Learning Research. 2023.

5. Vaswani A., Shazeer N., Parmar N. и др. Attention is all you need // Advances in Neural Information Processing Systems. 2017. Т. 30. С. 5998–6008.

6. Thistlethwaite M.B. The 45–52 Move Strategy // Cubism For Fun. 1981. № 1. С. 10–18.

7. Kociemba H. Close to God's algorithm // Cubism For Fun. 1992. № 28. С. 10–13.

8. Korf R.E. Finding optimal solutions to Rubik's Cube using pattern databases // Proceedings of the Fourteenth National Conference on Artificial Intelligence (AAAI-97). Providence, RI: AAAI Press. 1997. С. 700–705.

9. Chervov A., Khoruzhii K., Bukhal N. и др. A machine learning approach that beats Rubik's cubes // Advances in Neural Information Processing Systems. 2025. Т. 38. С. 1–12.

10. Kool W., van Hoof H., Welling M. Attention, learn to solve routing problems! // Proceedings of the International Conference on Learning Representations (ICLR 2019). New Orleans, 2019. С. 1–12.

11. Hart P.E., Nilsson N.J., Raphael B. A formal basis for the heuristic determination of minimum cost paths // IEEE Transactions on Systems Science and Cybernetics. 1968. Т. 4. № 2. С. 100–107.

12. Holbrook R., Reade W., Howard A. Santa 2023 — The Polytope Permutation Puzzle [Электронный ресурс] // Kaggle Competition. 2023. URL: https://www.kaggle.com/competitions/santa-2023 (дата обращения: 24.05.2026).

А.Г. АНАНИКЯН, К.С. ЯКОВЛЕВ
Санкт-Петербургский государственный университет
alex26.std@gmail.com

ВЛИЯНИЕ ОБУЧАЮЩИХ ДАННЫХ НА КАЧЕСТВО НЕЙРОСЕТЕВОЙ ЭВРИСТИКИ В СРЕДЕ PUSHWORLD

Рассматривается задача повышения эффективности эвристического поиска в среде PushWorld. Основное внимание уделяется не архитектуре модели, а составу обучающих данных для нейросетевой оценки состояний. В работе сравниваются два варианта обучения: только на базовом процедурном наборе Level 0 и на расширенном наборе, дополненном специально сконструированными семействами задач. Показано, что добавление авторского датасета заметно улучшает перенос на более сложные конфигурации Level 1 и повышает итоговую решаемость задач. Лучший результат на общем тестовом наборе достигается при использовании обученной оценки в гибридной схеме поиска.

Ключевые слова: *эвристический поиск, PushWorld, обучающие данные, нейросетевые эвристики, генерация задач, перенос, планирование.*

Введение

Задачи поиска и планирования в дискретных средах остаются важным направлением исследований в искусственном интеллекте. Даже при простых локальных правилах такие задачи часто обладают большим пространством состояний и сложными долгосрочными зависимостями между действиями. Под эвристическим поиском далее понимается поиск, в котором выбор следующего состояния направляется специальной оценкой близости к цели, называемой эвристикой. Классическими инструментами в этой области являются алгоритмы A* [1] и WA* [2].

В последние годы машинное обучение активно используется для построения эвристик поиска [4], [5, 6]. Однако для PushWorld особенно важен не только сам способ обучения, но и то, насколько обучающие данные покрывают трудные режимы среды. Если модель видела только простые конфигурации, ее сигнал может оказаться мало полезным при переносе на более сложные задачи.

Поэтому в данной работе основной вопрос формулируется так: можно ли улучшить практическое качество нейросетевой эвристики в PushWorld

не за счет усложнения алгоритма, а за счет более содержательного обучающего набора. Мы сравниваем базовый датасет Level 0 и расширенный авторский набор специальных задач, а затем оцениваем, как это влияет на решаемость задач Level 1 и итогового тестового набора [3], [7].

Постановка задачи

Будем рассматривать задачу PushWorld как поиск пути в графе состояний. Каждое состояние задается положением агента, неподвижных препятствий и всех подвижных объектов. Из состояния s агент может выполнить одно из четырех действий, если такое действие разрешено правилами среды. Требуется найти корректный план, то есть последовательность разрешенных действий, переводящую начальное состояние в целевое.

Алгоритм A* последовательно строит дерево поиска, начиная с начального состояния. На каждом шаге он хранит множество уже обнаруженных, но еще не обработанных состояний и выбирает из него то состояние, которое в данный момент считается наиболее перспективным. Именно для этого каждому состоянию n назначается приоритет, по которому состояния упорядочиваются в очереди поиска.

Пусть $g(n)$ обозначает стоимость пути от начального состояния до вершины n, а $h(n)$ – эвристическую оценку стоимости достижения цели, то есть приближенную оценку того, сколько еще действий требуется до решения. Тогда в A* приоритет состояния задается величиной

$$f(n) = g(n) + h(n). \quad (1)$$

Слагаемое g(n) отвечает за уже пройденную часть пути, а $h(n)$ – за предполагаемую оставшуюся стоимость до цели. Таким образом, A* на каждом шаге выбирает состояние с наименьшим значением $f(n)$ обрабатывает его, то есть строит все допустимые переходы в соседние состояния, и добавляет эти состояния в очередь поиска. Такую обработку состояния далее будем называть его раскрытием. Поэтому качество эвристики h(n) напрямую влияет на то, в каком порядке будут рассматриваться состояния и насколько быстро поиск доберется до решения.

В алгоритме WA* используется взвешенная функция

$$f_w(n) = g(n) + w \cdot h(n), w \geq 1, \quad (2)$$

что позволяет уменьшить вычислительные затраты ценой возможной неоптимальности решения [2].

В качестве базовой эвристики используется Manhattan-оценка для целевых объектов. Для одного объекта она равна сумме модулей разностей координат текущего и целевого положения. Обозначим через $h^*(s)$ истинную

минимальную стоимость достижения цели из состояния s. Будем называть эвристику допустимой, если для любого состояния выполняется неравенство $h(s) \leq h^*(s)$ то есть эвристика никогда не завышает истинную минимальную стоимость.

Если целевой объект один, Manhattan-оценка естественна, поскольку за одно действие его положение может измениться не более чем на одну клетку. Если целевых объектов несколько, то суммирование Manhattan-расстояний уже не является естественным допустимым обобщением: в PushWorld одно действие может одновременно сдвигать несколько объектов, и потому сумма расстояний может уменьшаться сразу по нескольким объектам за один шаг. Именно поэтому в качестве естественного допустимого обобщения используется максимум Manhattan-расстояний по всем целевым объектам. В практических режимах поиска можно также рассматривать сумму расстояний как более агрессивный вариант приоритизации, но такая оценка уже может оказаться больше $h^*(s)$ и, следовательно, не обладает свойством допустимости.

Наша задача состоит в том, чтобы построить планировщик, решающий наибольшее количество заданий из заранее фиксированного набора данных с ограничением по времени работы. Среди таких планировщиков мы хотим получить такой, который тратит наименьшее количество времени на решение этих заданий.

Метод и обучающие данные

Прямая оптимизация поведения поиска по числу раскрытий неудобна, поскольку эта величина зависит от всей последовательности решений алгоритма. Поэтому в работе используется более простой косвенный подход: нейронная сеть обучается предсказывать остаточную стоимость до цели на оптимальной траектории.

Сначала каждая обучающая задача решается алгоритмом A*, после чего восстанавливается оптимальный путь

$$\pi^* = (s_0, s_1, \ldots, s_T). \quad (3)$$

Для состояния s_t, лежащего на этом пути, точная остаточная стоимость равна T – t. Тем самым одна решенная задача задает набор корректно размеченных состояний с точными значениями целевой эвристики. В обучающую выборку включается каждое второе состояние оптимальных траекторий.

В качестве модели используется сверточная нейронная сеть h_theta, получающая на вход тензорное представление состояния PushWorld размера 8 x 33 x 57, где 8 соответствует числу каналов, а 33 x 57 – пространствен-

ному размеру рабочей области. Архитектура сети выбрана намеренно простой: сначала применяются два сверточных слоя с ядром 3 x 3, переводящие вход из 8 каналов в 64, а затем сохраняющие число каналов равным 64; после каждого из них используется функция активации ReLU, после чего выполняется max-pooling по окну 2 x 2. Далее следуют еще два сверточных слоя с тем же ядром 3 x 3, увеличивающие число каналов с 64 до 128 и затем сохраняющие его равным 128, также с активацией ReLU после каждого слоя. Полученная карта признаков усредняется по пространственным координатам, в результате чего формируется вектор длины 128, который подается на небольшой полносвязный выходной блок 128 -> 128 -> 1 с промежуточной активацией ReLU. На выходе применяется функция Softplus, обеспечивающая неотрицательность предсказания.

Для стабилизации обучения предсказывается не сама остаточная стоимость h*(s), а логарифмически сжатая величина

$$y(s) = log(1 + h^*(s)). \quad (4)$$

На выходе применяется гладкая неотрицательная функция активации Softplus, после чего выполняется обратное преобразование

$$h_\theta(s) = exp(\hat{y}_\theta(s)) - 1. \quad (5)$$

Обучение проводится как задача регрессии с функцией потерь Smooth L1 и алгоритмом оптимизации Adam. Разбиение на обучающую и валидационную выборки выполняется по картам, а не по отдельным состояниям, чтобы избежать утечки информации между близкими состояниями одной и той же траектории.

Ключевую роль в настоящей работе играет состав обучающих данных. В базовом варианте модель обучается только на процедурно сгенерированном наборе Level 0, содержащем сравнительно простые задачи и позволяющем выучить основные пространственные закономерности домена. Этот набор служит естественной отправной точкой для оценки того, насколько знания, полученные на простом распределении, переносятся на более сложные конфигурации.

Для усиления модели далее используется также предложенный автором набор данных, состоящий из семейств detour, block_unblock, sliding_block_clearing и narrow_corridor. Эти семейства специально сконструированы так, чтобы покрывать характерные трудные режимы PushWorld: узкие проходы, вынужденные обходы, ситуации с предварительной разблокировкой пути и конфигурации, в которых препятствие является не просто помехой, а существенной частью решения.

Тем самым в работе сравниваются два варианта обучения эвристики: базовый, обученный только на Level 0, и усиленный, обученный на объединении Level 0 с авторским набором данных. Именно это различие в составе обучающего набора далее рассматривается как основной фактор, влияющий на качество переноса модели на более сложные задачи.

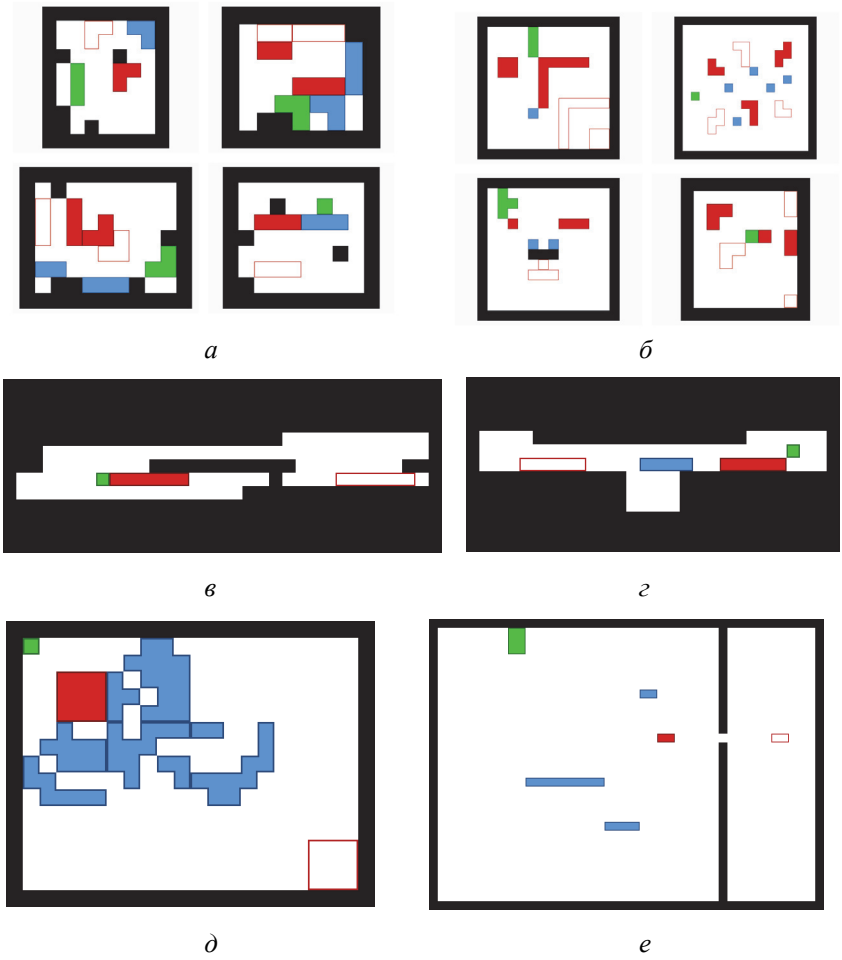


Рис. 1. Примеры заданий: а) четыре задания Level 0; б) четыре задания Level 1; в) задание detour; г) задание block_unblock; д) задание sliding_block_clearing; е) задание narrow_corridor

Использование обученной оценки в поиске. В итоговых экспериментах обученная нейросетевая оценка используется как дополнительный сигнал для поиска, а не как его полная замена. Такой вариант нужен для того, чтобы проверить практическую пользу улучшенного обучающего набора в рабочем решателе.

Практически итоговая конфигурация чередует глобальный поиск, направляемый нейросетевой оценкой, и локальную доработку с Manhattan-эвристикой. Для настоящей работы важно, что во всех таких экспериментах меняется прежде всего качество обученной оценки, а ключевой источник этого изменения связан именно с составом данных.

Экспериментальное исследование

Экспериментальная схема построена так, чтобы отдельно проверить вклад обучающих данных. Сначала оценивается модель на Level 0, затем проверяется ее перенос на более сложный набор Level 1, после чего измеряется эффект от добавления авторского датасета. В конце лучшая версия используется в итоговом сравнении на общем тестовом наборе.

Обучение и оценка на Level 0. Эксперимент на Level 0 нужен прежде всего как контрольный: он показывает, что модель вообще извлекает полезный сигнал из обучающего распределения. На наборе Level 0 каждому решателю давалось по 5 с на задачу. Результаты приведены в табл. 1.

Таблица 1

Результаты на наборе Level 0

Алгоритм	Решено из 1400	Среднее число раскрытий	Среднее время, с	Средняя длина плана
A* + max	1386	960,96	0,055	11,40
A* + sum	1392	644,96	0,033	11,40
A* + nn	1380	147,82	0,126	11,58
WA*(5) + max	1398	292,63	0,016	11,68

Из табл. 1 видно, что на задачах, близких к обучающим, нейросетевая оценка действительно информативна: она резко уменьшает число раскрытых состояний. Однако сам по себе этот результат еще не отвечает на главный вопрос работы, поскольку Level 0 слишком близок к данным обучения.

Перенос на более сложные задачи. Далее базовая модель, обученная только на Level 0, запускалась на более сложном наборе Level 1 без дополнительного дообучения. Именно здесь проверяется, насколько простого

обучающего набора хватает для переноса на новые типы конфигураций. Результаты приведены в табл. 2.

Таблица 2

Перенос модели, обученной на Level 0, на набор Level 1

Алгоритм	Решено из 68	Среднее число раскрытий	Среднее время, с	Средняя длина плана
A* + max	50	2685,51	0,172	21,10
A* + sum	53	2424,05	0,159	21,10
A* + nn	39	1059,23	0,826	21,51
WA*(5) + max	56	1861,28	0,097	22,74

Из табл. 2 видно, что модель, обученная только на Level 0, переносится недостаточно хорошо: несмотря на небольшое число раскрытий, по числу решенных задач она заметно уступает классическим эвристикам. Это означает, что проблема заключается не только в способе использования модели, но и в содержательности обучающих данных.

Для проверки этой гипотезы обучающий набор был расширен специально сконструированными задачами. Усиленная модель обучалась на объединении Level 0 и авторского датасета, после чего снова тестировалась на Level 1. Результаты приведены в табл. 3.

Таблица 3

Результаты на Level 1 после усиления обучающего набора

Алгоритм	Решено из 68	Среднее число раскрытий	Среднее время, с	Средняя длина плана
A* + sum	53	2433,39	0,160	20,97
WA*(5) + max	56	1595,31	0,080	22,13
A* + nn	39	1019,63	0,762	21,39
A* + nn (расширенный датасет)	45	675,42	0,583	21,21

Добавление авторского датасета дает прямой измеримый эффект: число решенных задач на Level 1 возрастает с 39 до 45, а среднее число раскрытий

и среднее время одновременно уменьшаются. Тем самым основная гипотеза работы подтверждается: специально подобранные обучающие данные улучшают перенос нейросетевой эвристики на более сложные задачи.

Хотя даже после этого нейросетевая оценка не становится безусловно лучшей при прямой подстановке в A*, именно этот результат показывает, что качество данных является самостоятельным и сильным фактором улучшения. Поэтому в финальной части работы используется та же усиленная модель, но уже внутри итоговой схемы поиска.

Итоговое сравнение на общем наборе из 63 задач. Дополнительно была проверена практическая польза усиленной модели в итоговой поисковой схеме на общем наборе из 63 задач, использованном также во внешнем сравнении [7]. При ограничении по времени 1800 с итоговая схема с обучаемой оценкой решает 61 задачу из 63.

Этот результат важен прежде всего потому, что он показывает: выигрыш от более сильного обучающего набора сохраняется не только на промежуточном тесте Level 1, но и в финальном сравнении с внешними и внутренними базовыми методами. Для сравнения использовались опубликованные результаты AVStar и LAMA из [7], а также Manhattan-варианты поиска на основе WA*.

Таблица 4

Сравнение методов на общем наборе из 63 задач PushWorld

Метод	Решено	Доля решенных, %
AVStar [7]	57/63	90,5
LAMA [7]	59/63	93,7
WA* + Manhattan max	58/63	92,1
WA* + Manhattan sum	59/63	93,7
Итоговая схема с обучаемой оценкой	61/63	96,8

Из табл. 4 видно, что итоговая конфигурация является лучшей среди рассматриваемых методов по числу решенных задач. Следовательно, улучшение обучающего набора влияет не только на внутренние метрики модели, но и на основную практическую метрику всей системы.

Обсуждение результата. Главный вывод по результатам экспериментов состоит в том, что для PushWorld качество обучающих данных оказывается не менее важным, чем сама схема использования нейросетевого сигнала. Переход от простого набора Level 0 к расширенному авторскому датасету дает устойчивое улучшение на более сложных конфигурациях и повышает итоговую решаемость задач.

Заключение

В работе рассмотрена задача повышения эффективности поиска в среде PushWorld за счет обучаемой оценки состояний. Основной акцент был сделан не на усложнении модели, а на том, как структура обучающего набора влияет на перенос нейросетевой эвристики на более трудные задачи.

Показано, что обучение только на Level 0 недостаточно для уверенного переноса на набор Level 1. Добавление авторского датасета со специально сконструированными семействами задач повышает число решенных задач с 39 до 45 и одновременно уменьшает среднее число раскрытий и среднее время.

Итоговая схема с обучаемой оценкой, использующая усиленную модель внутри рабочей поисковой конфигурации, решает 61 задачу из 63 на общем тестовом наборе PushWorld и превосходит AVStar, LAMA и Manhattan-варианты WA* по числу решенных задач.

Тем самым главным вкладом работы можно считать построение содержательного обучающего набора для трудных режимов PushWorld и экспериментальное подтверждение того, что именно этот шаг дает заметное практическое улучшение. Дальнейшая работа может быть связана с расширением авторского датасета и более систематической генерацией сложных обучающих задач.

Список литературы

1. Hart P.E., Nilsson N.J., Raphael B. A formal basis for the heuristic determination of minimum cost paths // IEEE Transactions on Systems Science and Cybernetics. 1968. Vol. 4. No. 2. P. 100–107.

2. Pohl I. Heuristic search viewed as path finding in a graph // Artificial Intelligence. 1970. Vol. 1. No. 3–4. P. 193–204.

3. George D., Kansky K., Wu T., Selsam D., Lerer A., Mikulik V., Allen K.R., Dermul A., Thakoor S., Tenenbaum J.B. PushWorld: a benchmark for manipulation planning with tools and movable obstacles // arXiv. 2023. arXiv:2301.10289. URL: https://arxiv.org/abs/2301.10289.

4. Tamar A., Levine S., Abbeel P., Wu Y., Thomas G. Value Iteration Networks // Advances in Neural Information Processing Systems. 2016. Vol. 29. P. 2146–2154.

5. Pandy M., Qiu W., Corso G., Velickovic P., Ying Z., Leskovec J., Lio P. Learning graph search heuristics // Proceedings of the First Learning on Graphs Conference. 2022. Vol. 198. P. 10:1-10:13.

6. Kirilenko D., Andreychuk A., Panov A., Yakovlev K. TransPath: learning heuristics for grid-based pathfinding via transformers // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2023. Vol. 37. No. 10. P. 12436–12443.

7. Hesse Y. On Limits of GNNs for Planning in PushWorld: master's thesis. Aachen: RWTH Aachen University, 2025. URL: https://ml.rwth-aachen.de/theses/hesse2025.pdf.

Секция

Обучение с подкреплением в нейробиологии и в системах искусственного интеллекта

М.В. ЛЮБИН[1], К.С. ЯКОВЛЕВ[2]
[1]Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
[2]Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук, Москва
mvliubin@edu.hse.ru, kyakovlev@frccsc.ru

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ АЛГОРИТМА PPO В ЗАДАЧЕ PUSHWORLD ЗА СЧЁТ МОДИФИКАЦИИ СРЕДЫ

PushWorld − предложенный в 2023 году исследователями компании DeepMind набор задач, в которых агент должен перемещать объекты в заданные позиции, используя инструменты и учитывая физику среды. Обучение с подкреплением в среде PushWorld остаётся трудной задачей для безмодельных алгоритмов, таких как PPO. В работе предложены модификации PPO и среды обучения для повышения эффективности. Проведено обширное экспериментальное исследование, показавшее преимущество предложенного метода по сравнению с мировыми аналогами.

Ключевые слова: *обучение с подкреплением, PPO, PushWorld.*

Введение

PushWorld, представленный в [1], является бенчмарком для планирования на плоскости, где агент должен переместить объекты по координатной сетке на их целевые позиции, используя инструменты и учитывая физику среды. В отличие от аналогичных сред планирования, PushWorld одновременно сочетает несколько источников сложности: навигацию агента по 2D-сетке, взаимодействие с подвижными объектами, объекты различной формы, множественные цели и специальные объекты-инструменты. Например, в Sokoban также присутствует навигация и взаимодействие с подвижными объектами, однако объекты имеют простую форму, а механика не включает использование инструментов.

В оригинальной статье для решения задачи PushWorld был предложен эвристический планировщик. Эвристические алгоритмы показывают сильные результаты во многих доменах, таких как Sokoban, Logistics и др. [2, 3]. Однако из-за проклятия размерности и сильной зависимости от функции оценки, созданной авторами, с ростом размеров пазла или добавлением новых условий/механик эффективность планировщиков снижается.

Остальные работы, решающие задачу PushWorld, опираются на RGNN, который ограничен в выразительности, и либо требует ручной настройки предикатов, либо имеет слишком жёсткие ограничения на решаемые задачи, как в работе Stante [7].

Обучение с подкреплением позволяет уменьшить зависимость от вручную заданных эвристик и может применяться как для обучения стратегии действий, так и для построения функции оценки состояний, как в работе [4]. PPO [5] является классическим алгоритмом обучения с подкреплением, который показывает хорошие результаты в комбинаторных средах, например в среде из [6]**.** Несмотря на это, в среде PushWorld он показывает низкие результаты. Это указывает на то, что стандартная среда плохо подходит для безмодельного обучения с подкреплением и что модификация среды может существенно повысить эффективность PPO. В настоящей работе предлагается модификация среды, которая уменьшает роль навигации в задаче PushWorld, используя макродействия, новые наблюдения и изменения награды.

Постановка задачи

Неформально пазл представляет собой двумерную сетку с объектами различных типов (см. рис. 1). Объекты чёрного цвета не могут менять своё расположение, в то время как все остальные остаются подвижными. Объект зелёного цвета является агентом, остальные являются либо целевыми объектами (красные), либо инструментами (синие). Красных и синих объектов может быть несколько. Агент может двигаться влево, вправо, вверх, вниз, инициируя движение других объектов, что в свою очередь может вызывать движение других объектов по цепочке. Цель пазла состоит в том, чтобы расположить все целевые объекты на их позициях (красные контуры).

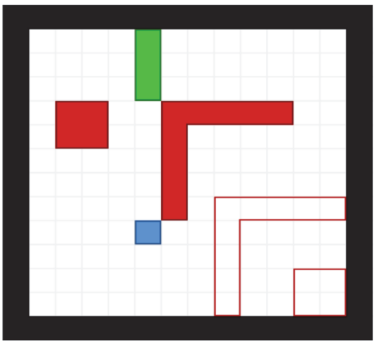


Рис. 1. Пример пазла PushWorld

Формально объект i в пазле PushWorld описывается как $\mathrm{P_i} = (\mathrm{p_i}, \mathrm{n_i}, \mathrm{Z_i})$, где $p_i \in Z^2$ – позиция объекта; $n_i \in N$ – число клеток объекта; $Z_i = \{a_{i,j} | a_{i,j} \in Z^2, j \in [1, n_i]\}$ – положение всех точек относительно p_i.

Пусть $O_i = \{c + p_i \mid c \in Z_i\}$.

Пазл в PushWorld состоит из 6 компонентов (n, s, A, G, T, W):

1. $n \in N$ – количество объектов
2. $s = \{\mathrm{P_i} \mid i \leq n\}$ – текущее состояние пазла. При этом $\forall\, i, j | i \neq j$, $O_i \cap (O_j \cup W) = \emptyset$ (усл. 1). $S = \{s | s$ выполнено усл. 1$\}$
3. $A = \{(-1,0), (1,0), (0,1), (0,-1)\}$ – множество действий
4. G – множество целевых позиций. Пазл считается решённым, если $s \in G$. G задаётся числом $k \geq 1$ – количество целевых объектов, и $g: \{2, \ldots, k+1\} \to Z^2$. $x \in G$ равносильно $\forall\, i \in [2; 1+k]$, $\mathrm{g(i)} = \mathrm{p_i}$, $\mathrm{p_i} \in x$
5. $W \subseteq Z^2$ – множество позиций стен
6. $T: S \times A \to S$ функция задана так:

$M(s,a) \subseteq \{1, \ldots, n\}$, $c \in M(s,a) \Leftrightarrow \exists\, \{\mathrm{i_1}, \ldots, \mathrm{i_k}\}$, такая, что:

a. $i_1 = 1$

b. $\mathrm{i_k} = c$

c. $\forall\, t \in \{1, \ldots, k-1\}$ выполнено $\{d + a \,|d \in O_{i_t}\} \cap O_{i_{t+1}} \neq \emptyset\}$

$T(s,a) = s$, если $\exists\, i \in M(s,a) | \{d + a \,|d \in O_i\} \cap W \neq \emptyset$

$T(s,a) = \{(p_i + a, n_i, Z_i) | i \in M(s,a)\} \cup \{(p_i, n_i, Z_i) \mid i \in (\{1, \ldots, n\} \setminus M(s,a))\}$

Задача состоит в нахождении $k \in N, \{a_1, a_2, \ldots a_k\} \in A^k$, таких, что $T(T(\ldots(T(s,a_1),a_2)\ldots),a_k) \in G$.

Бенчмарк

Помимо пазла, в оригинальной статье предложен датасет из пазлов, разбитых на 5 уровней сложности с 0 по 4, уровни сложности 1–4 созданы вручную, пазлы сложности 0 являются автоматически сгенерированными.

Работа сосредоточена на решении пазлов группы 0, поскольку суммарно пазлов с уровнем сложности > 0, не более чем 200 шт., что недостаточно для обучения моделей. Пазлы сложности 0 разбиты на 6 подгрупп. Параметры и названия групп представлены в таблице 1. Каждая группа дополнительно разделена на обучающую и тестовую выборки. Обучающая выборка состоит из 1000 пазлов, тестовая – из 200. Все пазлы имеют решение.

Таблица 1

Группы пазлов и их отличия

Название группы	Размер	Число стен	Число инструментов	Число целей	Форма фигур
Base	5x5	3	1	1	1x1
Large Puzzles	[5;10]x [5;11]	3	1	1	1x1
walls	5x5	3-5	1	1	1x1
obstacles	5x5	3	2	1	1x1
shapes	5x5	3	1	1	1-3 клеточные фигуры
goals	5x5	3	1	2	1x1 или 2x1
all	[5;10]x [5;10]	3-5	1-2	1-2	1-3 клеточные фигуры

Связанные работы

В оригинальной статье [1] кроме пазлов также предлагался эвристический планировщик, способный решать более 60 % пазлов сложности 1–4. Однако из-за экспоненциального роста числа состояний в зависимости от размерности применение такого подхода ограничено.

В то же время обучение с подкреплением показывает сильные результаты даже в средах со значительным количеством состояний, как, например, в играх Atari [8]. Однако в PushWorld награда является сильно разреженной, из-за этого классические алгоритмы обучения с подкреплением в ней показывают низкие результаты. Согласно статье [1], PPO и DQN [9] решали только 5 и 10 % пазлов уровня сложности 0 из группы all/test.

Позже в работах [7, 10] адаптировали графовый формат задачи и, используя RGNN, получали результаты лучше, в частности модель, обученная Hesse с использованием алгоритма поиска путей A* [11], решила более 50 % пазлов из all/test группы. Но из-за ограничений RGNN для корректной работы требовалось более 25 графовых слоёв, а также построение дополнительных вершин в графовом представлении, чтобы гарантировать вычислимость функции оценки, что затрудняет применение подобных методов в других задачах. Таким образом, вопрос о том, можно ли повысить эффективность PPO в среде PushWorld без использования графового формата остаётся открытым.

Метод

В оригинальной среде награда выдается за решение пазла(+10), за постановку объекта на целевую позицию (+1) и за каждый ход (-0,01), такая награда разрежена и почти на протяжении всего эпизода равна -0,01. Чтобы избавиться от этой проблемы и повысить эффективность работы PPO, в работе предлагается ряд изменений, а именно: модификация награды, модификация наблюдений и введение макродействий. Опишем эти изменения более подробно.

Изменённая награда.

1. Все оригинальные награды
2. +0,1 – за уменьшение манхэттенского расстояния между объектом и его целевым положением
3. +0,01 – за уменьшение минимального расстояния между объектом и агентом
4. -0,05 – за действие, обратное предыдущему (если не была сдвинута ни одна фигура)

В статье [1] наблюдением было само RGB изображение размером 444x444. Учитывая размер пазла, не превосходящий 10x10, эту информацию можно передать с использованием гораздо меньших размерностей. Поэтому были изменены наблюдения, и туда была добавлена дополнительная информация.

Пусть $L(X)$ – бинарная матрица расположения объекта в пазле, другими словами, для пазла $h \times w$ это $M \in R^{h \times w}$, где $M_{i,j} = 1 \Leftrightarrow (i,j) \in X$. Пусть состояния пазла были $s_1, s_2, \dots, s_f$

Изменённые наблюдения.

1. $L(W)$ − позиции стен
2. $L(W \cup (\bigcup_{i=1}^{n} O_i))$ − позиции всех объектов

3. $T_i \ \forall\, i \in \{1, \dots, n\}$ (определение T_i дадим ниже)

4. 7 матриц из пункта 2, соответствующих наблюдениям за последние 7 ходов

5. $P = \{p_i \,|i \in \{1, \dots, n\}\}$ – координаты левого нижнего угла всех объектов

6. $H \in A^k$, где k – число прошедших действий, а H – фактическая история действий

Определим $SP(ind, a)$.

Пусть $\exists\, c \in N$ и $\{d_1, \dots, d_c\}$, такие что:

1. $p_1 = d_1$

2. $\forall\, j \in \{2, \dots, c\}, (d_j - d_{j-1}) \in A$

3. $\forall\, j \in \{1, \dots, c\}, (Z_1 + d_j) \cap (W \cup (\bigcup_{i=2}^{n} O_i)) = \emptyset$

4. $(Z_1 + d_c + a) \cap (O_{ind}) \neq \emptyset$

5. $\nexists\ c' < c,\ \{d'_1, d'_2, \dots, d'_{c'}\}$ удовлетворяет условиям 1-4

тогда $SP(ind, a) = \{d_1, \dots, d_c\}$ – т. е. это кратчайший путь агента, чтобы сдвинуть объект ind в сторону a.

Определим $DP(ind, a)$, также как $SP(ind, a)$, ослабив 3-е условие до

3. $\forall\, j \in \{1, \dots, c\}, (Z_1 + d_j) \cap (W) = \emptyset$

Тогда $DP(ind, a)$ – это кратчайший путь агента, чтобы сдвинуть ind объект в сторону a, который учитывает только коллизии со стенами, если $\nexists\, c$, тогда $DP(ind, a) = 0^{h \times w}$

T_i тензор состоит из:

1. $L(O_i)$ – положение i-го объекта

2. $L(Z_i + g(i))$, если $i \in \{2, \dots, k\}$, иначе $0^{h \times w}$ – целевая позиция

3. $\forall\, a \in A,\ SP(i, a)$, если она существует, иначе $DP(i, a)$

4. $L(\bigcup_{j=1}^{f}(p_i \,|p_i \in s_j))$ – путь фигуры за все время

Макродействия. Несмотря на вышеописанные изменения, награда в среде остаётся разреженной, и существенные изменения происходят, только если сдвигается какая-то фигура. С другой стороны в среде PushWorld существует такая алгоритмически разрешимая часть, как планирование пути на 2D-сетке, и, если эту часть нивелировать, то задача может оказаться значительно проще для алгоритмов обучения с подкреплением.

Для этого для всех объектов i и действий a были добавлены макродействия вида: передвинуться к объекту i и подвинуть его в сторону a. Формально, пусть существует $SP(i, a) = \{d_1, \dots, d_c\}$ тогда новое действие эквивалентно последовательности $\{d_2 - d_1, \dots, d_c - d_{c-1}, a\}$, как видно из определений, агент переместится к нужному объекту, не вызывая движения остальных, и сдвинет его. Макродействие считается одним шагом среды, а

награда вычисляется как сумма наград за все посещённые состояния. Кроме этого, использовалось маскирование пространства действий, исключая из рассмотрения новые действия, для которых не существует SP(i,a), или действия, которые не меняют состояния пазла.

Архитектура нейронной сети

В качестве алгоритма обучения модели для предсказания стратегии использовалось PPO с общим для актор и критика экстрактором признаков. Пункты 1-4 наблюдений объединяются в общий тензор и подаются в свёрточную нейронную сеть. Она состоит из 5 свёрточных слоёв с активацией ReLU и BatchNorm (число каналов 32, 64, 64, 64, 128), далее CBAM слой из статьи [12] и AdaptivePooling2d((6,6)).

Для обработки последовательности действий используется Transformer с 6 слоями и размерностью эмбеддингов 10 и косинусоидальным позиционным кодированием. Для обработки позиций объектов и объединения всех результатов используется MLP. Далее признаки передаются в головы актёра и критика, состоящие из 2 линейных слоёв (512, 256). Перед softmax логиты недопустимых действий маскируются. Схема архитектуры приведена на рис. 2.

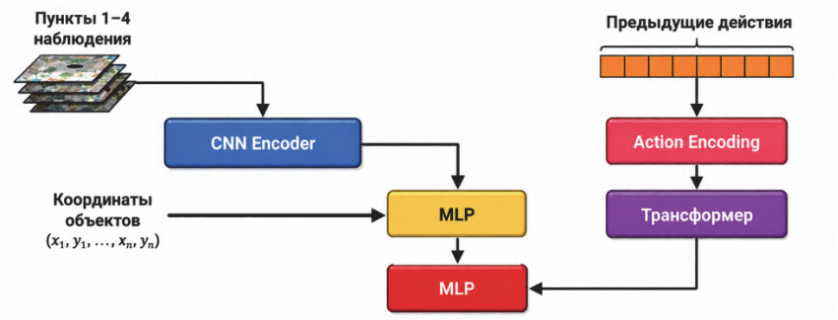


Рис. 2. Архитектура нейронной сети

Эксперименты

Вышеописанная модель (ОМ) и изменённый алгоритм PPO были реализованы, код доступен в репозитории [13]. Также были реализованы: модель без трансформера (БТ), без трансформера и обработки наблюдений из пункта 4 (БТО), модель из [1], обученная на среде с новыми действиями и

маскированием (Kansky + Н.Д.). Все вышеперечисленные модели были обучены при помощи модифицированного PPO, также мы протестировали эффективность DQN в новой среде и обучили модель OM + DQN. Для сравнения использовались модели из [1], из [7], AV* + CNN и AV* + RGNN из [10]. Сравнительная эффективность данных моделей, обученных на all/train, приведена на рис. 3, более детальные данные в табл. 2.

Как видно, предложенные решения показывают себя лучше, чем решения Kansky или Stante даже в тех конфигурациях, где модели не обучались. Также OM превосходит AV*+CNN почти на всех группах примерно на 18 п.п. Это важно, так как в основе OM также лежит CNN и суммарное число параметров моделей совпадает и составляет 4 млн. Важно, что OM превосходит AV* + RGNN на группе all, на которой они обе и обучались, что показывает, что она эффективно обучается на основной и одной из самых трудных конфигураций, а на остальных показывает схожий уровень генерализации.

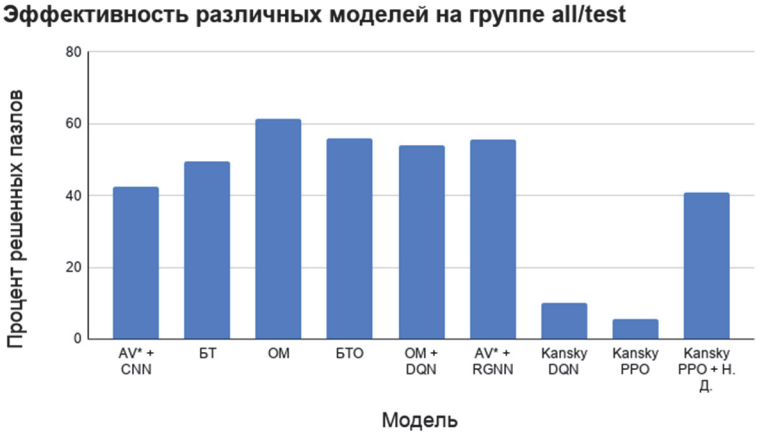


Рис. 3. Сравнение эффективности моделей

Подчеркнутые модели обучались на группе all, у остальных конфигурации тренировки и тестирования совпадают. * – тестирование не проводилось из-за особенностей дизайна моделей. Также стоит отметить, что наличие обработки предыдущих действий улучшает генерализацию, но при этом ухудшает результаты на той конфигурации, где происходит трени-

ровка. Кроме того, модель Kansky + Н.Д. превосходит оригинальную модель более чем в 6 раз на группе all/test, что показывает эффективность макродействий.

Таблица 2

Сравнение различных моделей в среде PushWorld, % решённых задач

Модель	base	large	walls	obstacles	shapes	goals	**all**
AV* + CNN	60	65	56	55,5	80	19	42,5
БТ	76	*	69	61,5	83,5	6,5	49,5
ОМ	83,5	*	74,5	72,5	87,5	23	**61,5**
БТО	51,5	*	46,5	44,5	79	11,5	56
ОМ + DQN	75,5	*	68,5	68,5	82,5	15	54
AV* + RGNN	83	96	82,5	77,5	89,5	22	55,5
Kansky DQN	19,5	61,8	13,1	13,1	17,1	0,2	10,1
Kansky PPO	40,4	71,5	23,3	21,4	24,2	1,1	5,7
Stante	59	66	60,5	52,5	*	*	*
Kansky PPO + Н. Д.	67,5	*	68	59,5	77,5	3,5	41

ОМ решила 4 из 63 пазлов сложности 1, что сравнимо с результатом RGNN, решившей 7/63. Обе модели не решили ни одного пазла сложности 2. На этих 4 решённых пазлах качество плана, равное отношению длины плана к длине плана планировщика LAMA у RGNN было 1,4, у ОМ 1,6, что говорит о том, что, несмотря на добавление действий, видоизменяющих траектории, алгоритм остаётся эффективным. При расчёте длины плана ОМ макродействия разворачиваются в базовые действия.

Выводы

Для повышения эффективности PPO в среде PushWorld была предложена и реализована новая среда и архитектура нейронной сети, с помощью PPO обучена модель, которая является лучшей среди безмодельных методов (AV* + RGNN является основанным на модели среды) и показывает на тренируемой конфигурации результаты лучше, чем все остальные подходы.

Отметим, что предложенный подход можно применять к задачам Sokoban и подобным и использовать вместе с приёмами и методами обучения из статей [7], [10].

Список литературы

1. Kansky K. et al. PushWorld: A benchmark for manipulation planning with tools and movable obstacles // arXiv preprint arXiv:2301.10289. 2023.

2. Pereira A. G., Ritt M., Buriol L. S. Optimal sokoban solving using pattern databases with specific domain knowledge // Artificial Intelligence. 2015. Т. 227. С. 52–70.

3. Helmert M. The fast downward planning system // Journal of Artificial Intelligence Research. 2006. Т. 26. С. 191–246.

4. Micheli A., Valentini A. Synthesis of search heuristics for temporal planning via reinforcement learning // Proceedings of the AAAI conference on artificial intelligence. 2021. Т. 35. №. 13. С. 11895–11902.

5. Schulman J. et al. Proximal policy optimization algorithms // arXiv preprint arXiv:1707.06347. 2017.

6. Lei K. et al. A multi-action deep reinforcement learning framework for flexible Job-shop scheduling problem // Expert Systems with Applications. 2022. Т. 205. С. 117796.

7. Stante S. Exploring the Limits of Relational Graph Neural Networks in PushWorld Erkundung der Grenzen von Relational Graph Neural Networks in PushWorld. 2024.

8. Mnih V. et al. Playing atari with deep reinforcement learning // arXiv preprint arXiv:1312.5602. 2013.

9. Mnih V. et al. Human-level control through deep reinforcement learning // Nature. 2015. Т. 518. №. 7540. С. 529–533.

10. Hesse Y. On Limits of GNNs for Planning in PushWorld : master's thesis / Y. Hesse ; RWTH Aachen University. Aachen, 2025. 108 p.

11. Hart P. E., Nilsson N. J., Raphael B. A formal basis for the heuristic determination of minimum cost paths // IEEE transactions on Systems Science and Cybernetics. 1968. Т. 4. №. 2. С. 100–107.

12. Woo S. et al. Cbam: Convolutional block attention module // Proceedings of the European conference on computer vision (ECCV). 2018. С. 3–19.

13. Lyubin M.V., Yakovlev K.S. Программная реализация модифицированной среды PushWorld и алгоритма PPO // GitHub. URL: https://github.com/mikkklyubbin/pushworld_rl (дата обращения: 08.06.2026).

И.С. ЗВОНАРЕВ[1], Ю.Л. КАРАВАЕВ[2]
Ижевский государственный технический университет
имени М.Т. Калашникова
[1]atmoscrystalline@gmail.com, [2]karavaev_yury@istu.ru

ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМА ОБУЧЕНИЯ С ПОДКРЕПЛЕНИЕМ TD3 В ЗАДАЧЕ ПЛАНИРОВАНИЯ ТРАЕКТОРИИ ДВИЖЕНИЯ НЕПОЛНОПРИВОДНОГО СФЕРОРОБОТА

В работе исследовано влияние способа параметризации управляющих воздействий и структуры функции награды на качество планирования траектории неполноприводного сфероробота с использованием алгоритма TD3 (Twin Delayed Deep Deterministic Policy Gradient). Сформулированы и экспериментально сопоставлены две постановки задачи: кинематическая, основанная на формировании линейной и угловой скоростей, и динамическая, предусматривающая непосредственное управление крутящими моментами на осях вращения ротора и маятника. Оценка сформированных политик проводилась по показателям успешности достижения цели и эффективности траектории. Установлено, что динамическая постановка обеспечивает более точное планирование пути. Анализ переходных процессов при старте и остановке выявил стартовую раскачку маятника, влияющую на устойчивость движения и длину траектории. Полученные результаты показывают, что учёт динамики внутреннего механизма, расширение вектора наблюдений и соответствующая модификация функции награды позволяют повысить управляемость неполноприводным сферороботом (СР).

Ключевые слова: *TD3, планирование пути, функция награды, сфероробот, ROS2.*

Введение

Методы глубокого обучения с подкреплением применяются в робототехнике для навигации, управления манипуляторами и захвата объектов, формирования локомоции шагающих платформ, а также решения задач мобильной манипуляции [13–17]. Их использование особенно целесообразно при нелинейной динамике объекта и затруднённом аналитическом синтезе закона управления. При этом качество получаемой политики существенно зависит от представления состояния, параметризации пространства действий и структуры функции награды [1]. Результаты, полученные в работе

[19] подтверждают возможность и эффективность использования RL для задач планирования движения мобильных роботов (МР). При этом для обучения и сопоставления результатов модели используются кинематические модели движения МР. Однако для управления мобильными роботами, характеризующимися нелинейной динамикой, при движении к заданному положению требует учёта не только кинематических, но и динамических свойств объекта.

Для неполноприводных сфероробототов задача управления осложняется нелинейным взаимодействием сферической оболочки и внутренних исполнительных механизмов, а также влиянием переходных процессов на характер движения [3–8]. Целью настоящей работы является исследование влияния двух постановок задачи управления на качество движения комбинированного сфероробота к заданному целевому положению, оцениваемое по успешности достижения цели и эффективности формируемой траектории. Сопоставляются кинематическая постановка, основанная на формировании линейной и угловой скоростей, и динамическая постановка, предусматривающая непосредственное задание управляющих моментов ротора и маятника. Дополнительно анализируется влияние начальных колебаний маятника на формирование траектории.

Одним из наиболее актуальных алгоритмов RL, применяемых в задачах непрерывного управления, является TD3 (Twin Delayed Deep Deterministic Policy Gradient), эффективность которого при планировании движения мобильных роботов показана в работе [2]. Использование двух критиков, задержанного обновления политики и сглаживания целевых действий позволяет снизить переоценку функции ценности и повысить устойчивость обучения [9]. Данный алгоритм планируется адаптировать под задачу управления СР с комбинированным приводом.

Описание объекта управления

Объектом настоящего исследования является комбинированный СР с маятниковым и роторным исполнительными механизмами, представленный на рис. 1. Теоретические основы управления сферическими роботами с маятниковым приводом и обратной связью рассмотрены в работах [3–5], а прикладные задачи стабилизации их движения – в работе [6]. Особенности движения СР комбинированного типа на практике при кинематическом управлении обсуждаются в работе [7], где подчеркивается существенное влияние на динамику условия контакта. Математическая модель рассматриваемой конструкции получена в работе [8] на основе уравнений Далам-

бера–Лагранжа второго рода в квазискоростях с неопределёнными множителями, учитывающими неголономные связи, и внешними управляющими воздействиями. Соответствующая приведенная система уравнений движения, записанная в подвижной системе координат связана с геометрическим центром СР, имеет вид:

$$\begin{gathered}\left(e_3, I_b(\dot{\Omega}+\ddot{\varphi}e_3)\right)=K_\varphi,\\ \left(e_1, I_b\left(\dot{\Omega}+\ddot{\vartheta}e_1\right)+\Omega\times\left((I_s+I_b)\Omega+\dot{\varphi}I_b e_3\right)-m_bR_bR_se_3\times\left(\left(\dot{\Omega}+\dot{\vartheta}e_1\times\Omega\right)\times\right.\right.\\ \left.\left.\times\gamma\right)+m_bR_b\gamma g\times e_3\right)=K_\vartheta,\\ \dot{\gamma}=\gamma\times(\Omega+\vartheta e_1),\\ (I_s+I_b)\,\bar{\dot{\Omega}}+\bar{\ddot{\boldsymbol{\vartheta}}}I_b\overline{\boldsymbol{e_1}}+\bar{\ddot{\boldsymbol{\varphi}}}I_b\overline{\boldsymbol{e_3}}+\left(\bar{\Omega}+\dot{\vartheta}\overline{\boldsymbol{e_1}}\right)\times\left((I_s+I_b)\bar{\Omega}+\dot{\vartheta}I_b\overline{\boldsymbol{e_1}}+I_b\overline{\boldsymbol{e_3}}\dot{\varphi}\right)+\\ +(m_s+m_b)R_s^2\gamma\times\left(\left(\bar{\dot{\Omega}}+\vartheta\bar{e_1}\times\bar{\Omega}\right)\times\gamma\right)-m_bR_bR_s\left(\bar{e_3}\times\left(\left(\bar{\dot{\Omega}}+\dot{\vartheta}\bar{e_1}\times\bar{\Omega}\right)\times\gamma\right)+\right.\\ \left.\gamma\times\left(\left(\bar{\dot{\Omega}}+\ddot{\vartheta}\bar{e_1}\right)\times\bar{e_3}+\left(\bar{\Omega}+\dot{\vartheta}\bar{e_1}\right)\times\left(\left(\bar{\Omega}+\dot{\vartheta}\bar{e_1}\right)\times\bar{e_3}\right)\right)\right)+mgR_b\gamma\times\bar{e_3}=0,\end{gathered}\tag{1}$$

где $I_b=diag(I_{b1},I_{b2},I_{b3})$ – тензор инерции внутреннего механизма (маятника) относительно его центра масс, K_ϑ − управляющий момент маятника сфероробота, K_φ - управляющий момент ротора сфероробота; e_1, e_3 − орты (единичные векторы), связанные с конструкцией робота, с геометрическим центром сферической оболочки; m_b − масса внутреннего маятника; m_s − масса сферической оболочки; m − суммарная масса системы; I_s − тензор инерции сферической оболочки относительно ее центра масс; R_b − расстояние от центра сферы до центра масс внутреннего маятника; R_s − радиус сферической оболочки; $g-$ вектор ускорения свободного падения; Ω − вектор угловой скорости корпуса (сферической оболочки); γ − единичный вектор вертикали, направленный вверх (нормаль к поверхности качения); ϑ − угол поворота/качания маятника вокруг оси e_1 (угол тангажа или крена внутреннего механизма); φ − угол поворота маятника (или ротора) вокруг оси e_3 (угол рысканья/собственного вращения).

Для описания движения центра сферического робота в неподвижной системе координат и вращение подвижных осей относительно неподвижных, вводятся следующие кинематические соотношения:

$$\dot{r}=Q^Tv,\quad \dot{Q}=\widetilde{\Omega}Q+\dot{\vartheta}AQ,\tag{2}$$

где $\widetilde{\Omega}$ и A – это матрицы вида:

$$\widetilde{\Omega}=\begin{pmatrix}0 & \Omega_3 & -\Omega_2\\ -\Omega_3 & 0 & \Omega_1\\ \Omega_2 & -\Omega_1 & 0\end{pmatrix},\quad A=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 0 & -1 & 0\end{pmatrix},\tag{3}$$

таким образом, получается замкнутая система уравнений (1-3), описывающая движение СР на плоскости. Уравнения (1-3) описывают динамику СР и для заданной траектории в виде $\{\dot{x}, \dot{y}, \Omega_3\}$ позволяют численно вычислить управляющие моменты K_ϑ, K_φ, то есть реализовать движение по заданной траектории [8]. Однако на практике прямое использование этих уравнений для синтеза управления характеризуется высокой вычислительной сложностью и наталкивается на ряд трудностей: принципиальную неразрешимость обратной задачи динамики в реальном времени, параметрическую неопределенность, и необходимость представления траектории в виде элементарных участков (гейтов).

Выбор базового алгоритма

В исследовании рассматривались алгоритмы TD3 (Twin Delayed Deep Deterministic Policy Gradient), SAC (Soft Actor-Critic) и DDPG (Deep Deterministic Policy Gradient), относящиеся к классу off-policy-методов и предназначенные для задач непрерывного управления. DDPG использует детерминированную политику и один критик, SAC формирует стохастическую политику с дополнительной максимизацией энтропии, а TD3 развивает подход DDPG за счёт применения двух критиков, задержанного обновления актора и сглаживания целевой политики. Эти механизмы позволяют TD3 уменьшить переоценку функции ценности и повысить устойчивость процесса обучения [9].

В качестве базового алгоритма был выбран TD3, поскольку он обеспечивает эффективное повторное использование накопленного опыта, соответствует непрерывному пространству управляющих воздействий сфероробота и обладает повышенной устойчивостью к ошибкам аппроксимации функции ценности. Выбор основан на результатах предварительного экспериментального сравнения TD3, SAC [10] и DDPG, представленных в Таблице 1. Для каждого алгоритма был выполнен 21 независимый запуск обучения с различными начальными значениями генераторов псевдослучайных чисел. Продолжительность каждого запуска составляла 500,000 шагов взаимодействия со средой, а максимальная длительность эпизода была ограничена 300 шагами. Алгоритмы сравнивались по средней награде за последние 100 эпизодов, стандартному отклонению, медиане и диапазону результатов между независимыми запусками, числу запусков с отрицательной итоговой наградой, а также по продолжительности обучения.

Таблица 1

Сравнение алгоритмов

Алгоритм	Награда за последние 100 эпизодов, (M \pm SD)	Медиана	Диапазон	Неуспешные запуски	Время обучения, ч
TD3	36,57 ± 35,96	46,92	−77,60…47,92	1	1,5
SAC	32,81 ± 34,52	43,31	−76,16…47,10	1	2,22
DDPG	33,98 ± 8,86	36,84	15,87…43,78	0	2,32

Для каждого независимого запуска рассчитывалась средняя награда за последние 100 эпизодов обучения. В табл. 1 приведены среднее значение (M), стандартное отклонение (SD), медиана, минимальное и максимальное значения данного показателя, рассчитанные по результатам 21 запуска. К запускам с отрицательной итоговой наградой относились случаи, в которых средняя награда за последние 100 эпизодов принимала значение меньше нуля.

TD3 показал наибольшую медианную награду и наименьшую продолжительность обучения, но характеризовался значительной вариативностью результатов. DDPG продемонстрировал более устойчивое обучение, однако уступил TD3 по медианной награде. Поэтому TD3 выбран в качестве базового алгоритма по совокупности показателей для дальнейшего исследования влияния пространства действий, состава наблюдений и функции награды на управление комбинированным сферороботом.

Методология

Модель мобильного робота воссоздана на основании реального прототипа (рис. 1, *а*) в графическом симуляторе Gazebo (рис. 1, *б*).

Основной задачей исследования является управление движением сфероробота из начального положения (0, 0) в целевую область с координатами $x_t, y_t \in [-1{,}8; 1{,}8]$ м. Эксперименты проводятся в Gazebo; среда обучения реализована с использованием библиотеки Gymnasium, а обмен данными с симулятором осуществляется через ROS2. Рассматриваются две постановки управления: кинематическая, основанная на задании линейной и угловой скоростей, и динамическая, использующая крутящие моменты на

осях выражения ротора и маятника. Постановки различаются пространствами действий и наблюдений, а также функциями награды. Общая структура метода представлена на рис. 2.



а б

Рис. 1. Модель сфероробота: *а* − прототип; *б* − модель в симуляторе

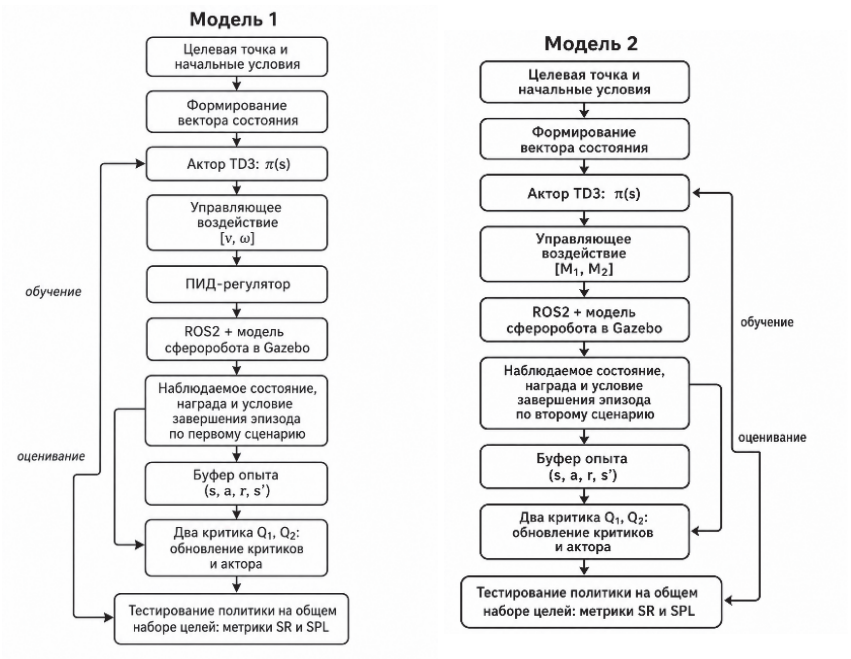


Рис. 2. Структура предложенного метода обучения и управления СР

Первый сценарий (кинематическое управление)

В кинематической постановке действие агента задаётся нормированными командами линейной и угловой скорости:

$$a_t^{(1)} = [v_t, \omega_t]^T. \quad (1)$$

Компоненты действия преобразуются в допустимые физические значения линейной и угловой скорости сфероробота. Вектор наблюдений определяется выражением

$$s_t^{(1)} = [v_t, \omega_t, d_t, \sin\Omega_t, \cos\Omega_t]^T, \quad (2)$$

где v_t и ω_t – текущие линейная и угловая скорости; Ω_t – угловое рассогласование между направлением движения робота и направлением на целевую точку; $\bar{d}_t$ – нормированное евклидово расстояние до цели:

$$d_t = \sqrt{((x \quad - x_{\text{г}}, \quad)^2 + (y \quad - y_{\text{г}}, \quad)^2}, \quad \bar{d}_t = d_t / d_{max}. \quad (3)$$

Функция награды включает терминальное поощрение за достижение целевой области, штраф за выход за границы рабочей области и промежуточную составляющую, пропорциональную уменьшению расстояния до цели:

$$\text{r}^{(1)} = \begin{cases} 50, & d \leq 0{,}1 \text{ м}; \\ -50, & (x_{\text{г}}, \ , y_{\text{г}}, \ ) \notin \text{W}; \\ 2{,}5 * (d_{t-1} - d_t) - 0{,}1, & \text{в остальных случаях}; \end{cases} \quad (4)$$

где W обозначает допустимую рабочую область. Достижение цели (цель считается достигнутой при приближении СР к точке ближе, чем на 0,1 м) и выход за её границы завершают эпизод; при достижении предельной продолжительности 300 шагов эпизод усекается по временному ограничению.

Терминальные значения $\pm$ 50 выбраны с учётом масштаба накопленной пошаговой награды. При интервале управления $\Delta t = 0{,}5\ (c)$ и максимальной линейной скорости $v_{max} = 1\ (\text{м}/c)$ максимальное уменьшение расстояния за один шаг составляет

$$d_{max} = \Delta t * v_{max} = 0{,}5 \text{ м}, \quad (5)$$

а максимальная нетерминальная награда равна

$$r_{max}^{(1)} = 2{,}5 \ * 0{,}5 - 0{,}1 = 1{,}15. \quad (6)$$

Параметры функции награды были установлены на предварительном этапе настройки и сохранялись неизменными при проведении основной серии экспериментов.

Второй сценарий (динамическое управление)

В динамической постановке агент непосредственно формирует нормированные команды управляющих моментов ротора и маятника:

$$\alpha_t^{(2)} = \left[M_{r,t}, M_{p,t}\right]^T. \quad (7)$$

Нормированные команды масштабируются в соответствии с допустимыми моментами исполнительных механизмов. Вектор наблюдений имеет вид

$$s_t^{(2)} = \left[\bar{M}_{r,t}, \bar{M}_{p,t}, \Delta\bar{x}_t, \Delta\bar{y}_t, \sin\Omega_t, \cos\Omega_t, \bar{v}_t, \bar{\omega}_t, \bar{M}_{r,t-1}, \bar{M}_{p,t-1}\right]^T, \quad (8)$$

где $\bar{M}_{r,t}, \bar{M}_{p,t}$ – текущие нормированные значения управляющих воздействий; $\bar{M}_{r,t-1}, \bar{M}_{p,t-1}$ – команды агента на предыдущем шаге; $\bar{v}_t, \bar{\omega}_t$ – нормированные скорости робота; $\Delta\bar{x}_t, \Delta\bar{y}_t$ – нормированные координатные рассогласования:

$$\Delta\bar{x}_t = \frac{x_t - x_{r,t}}{d_{max}}, \ \Delta\bar{y}_t = \frac{y_t - y_{r,t}}{d_{max}}, \quad (9)$$

Расширенный состав наблюдений отражает непосредственную связь управляющих моментов с динамикой внутренних механизмов и используется при более строгом критерии позиционирования, соответствующем радиусу целевой области 0,02 м.

Функция награды динамической постановки дополнительно учитывает ориентацию робота относительно направления на цель:

$$\mathrm{r}^{(1)} = \begin{cases} 50, & d \le 0{,}1 \text{ м}; \\ -50, & (x_\mathrm{r}, , y_\mathrm{r},) \notin \mathrm{W}; \\ 3 * (d_{t-1} - d_t) + 0{,}3 * \cos\Omega_t - \mathrm{C}_t, & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (10)$$

Составляющая $3 * (d_{t-1} - d_t)$ характеризует прогресс приближения к цели, $0{,}3 * \cos\Omega_t$ поощряет согласование курса с направлением на цель, а C_t ограничивает продолжительность эпизода. До середины эпизода принимается $\mathrm{C}_t = -0{,}03$. После 150-го шага применяется усиленный штраф:

$$\mathrm{C}_t = -0{,}03 - 0{,}3[\exp(1{,}5 * d_t)], \ \mathrm{t} > 150. \quad (11)$$

Коэффициенты функции награды были определены на предварительном этапе по масштабу её составляющих и критерию устойчивого достижения целевой области, после чего фиксировались для основной серии вычислительных экспериментов.

Следует отметить, что рассматриваемые постановки одновременно различаются пространствами действий и наблюдений, критерием достижения цели и структурой функции награды. Поэтому полученные результаты характеризуют эффективность каждой постановки в целом в заданных условиях моделирования и не интерпретируются как изолированная оценка влияния отдельных компонентов.

Экспериментальные результаты

Вычислительные эксперименты проводились для двух конфигураций управления комбинированным сфероробо̀том. В начале каждого эпизода робот располагался в точке (0; 0), а координаты центра целевой области $\{x_i; y_i\}$ задавались случайно в пределах:

$$-1{,}8 \le x_i \le 1{,}8\,, \qquad -1{,}8 \le y_i \le 1{,}8.$$

Радиус целевой области определялся на предварительном этапе настройки отдельно для каждой конфигурации управления. Последовательно исследовались пять значений радиуса в диапазоне от $0{,}02$ до $0{,}10$ м с шагом $0{,}02$ м. В качестве рабочего выбиралось минимальное значение, при котором обучение приводило к формированию политики, обеспечивающей достижение целевой области в тестовых эпизодах. Для кинематической конфигурации данному критерию соответствовал радиус $0{,}10$м, тогда как для динамической конфигурации работоспособность алгоритма сохранялась при радиусе $0{,}02$ м. Выбранные значения фиксировались и использовались в основной серии вычислительных экспериментов. Обучение каждой политики выполнялось в течение 10^6 шагов взаимодействия со средой, при этом продолжительность одного эпизода ограничивалась 300 шагами.

Для оценки обученных политик проводилось по $N = 100$ тестовых эпизодов. Тестирование выполнялось при фиксированном значении seed = 10 и на общем наборе целевых положений, что обеспечивало сопоставимость начальных условий для обеих конфигураций.

Успешность достижения цели оценивалась с помощью показателя Success Rate:

$$SR = \frac{1}{N} * \sum_{i=1}^{N} S_i * 100\ \%,$$

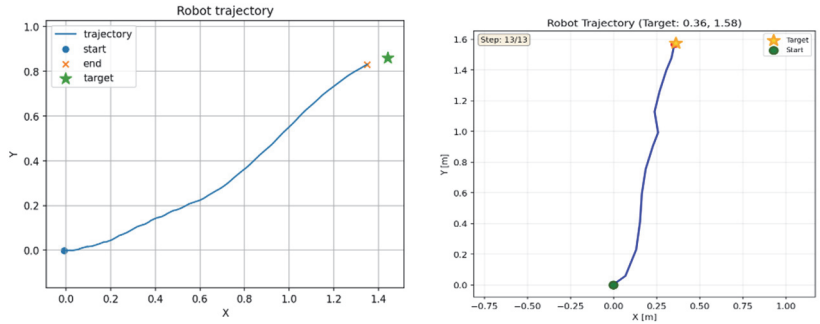
где $S_i = 1$, если в i-м эпизоде робот достиг целевой области, и $S_i = 0$ в противном случае.

Эффективность сформированной траектории оценивалась по метрике Success weighted by Path Length:

$$SPL = \frac{1}{N} * \sum_{i=1}^{N} S_i * \frac{L_{opt,i}}{\max(L_{opt,i}, L_i)},$$

где $L_{opt,i}$ – длина кратчайшего пути от начального положения до цели, L_i – фактическая длина траектории робота в i-м эпизоде. Множитель S_i исключает вклад неуспешных эпизодов в итоговое значение SPL. Такая запись соответствует исходному определению метрики для оценки навигационных агентов [12]. В рассматриваемой среде без препятствий $L_{\text{opt},i}$ соответствует евклидову расстоянию между начальной и целевой точками.

На рис. 3 приведены примеры траекторий, сформированных при кинематическом и динамическом способах управления.



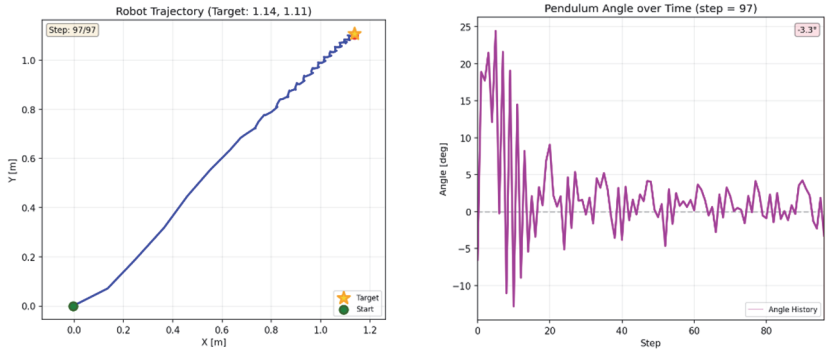
а *б*

Рис. 3. Примеры траекторий, пройденных сфероробото́м:
а – Модель генерирующая $[v, w]$;
б – Модель генерирующая $[M_{rotor}, M_{pendulum}]$

В конфигурации на рис. 3, *а* агент задаёт линейную и угловую скорости, преобразуемые ПИД-регулятором в моменты приводов. Такое кинематическое управление не в полной мере учитывает инерционные связи и переходные процессы внутренних механизмов. В конфигурации на рис. 3, *б* агент непосредственно формирует моменты ротора и маятника, что обеспечивает учёт динамики сфероробота при построении управления. Аналогичное сопоставление кинематической и динамической моделей выполнено Ю.Л. Караваевым и А.А. Килиным; авторы также отмечают значение

динамического описания при исследовании устойчивости и формировании управляющих манёвров [18].

При исследовании динамической конфигурации выявлен переходный режим, характеризующийся колебаниями маятника в начальной фазе движения. На рис. 4 представлены траектория перемещения робота к цели с координатами (1,14; 1,11) и соответствующее изменение угла отклонения маятника по шагам моделирования.



а *б*

Рис. 4. Особенность управления СР: *а* – траектория движения СР; *б* – график изменения угла положение маятника в зависимости от временного шага, равного 0,5 с

Как видно из рис. 4, *б* положение маятника близкое к его нижнему положению обеспечивает более стабильное и точное положение СР в конечной точке , в то время как при кинематическом управлении положение и скорость маятника не ограничиваем, что может привести к существенным колебаниям СР после отключения управления.

Таблица 2

Результаты экспериментов

Модель	*SR* (%)	*SPL*
1	85	0,67
2	98	0,89

В рассматриваемых условиях динамическая конфигурация обеспечила более высокие значения SR и SPL, что свидетельствует о большей успешности достижения целевой области и меньшем отклонении сформированных траекторий от кратчайшего пути. Вместе с тем конфигурации различаются не только пространством действий, но также составом наблюдений, структурой функции награды и точностью позиционирования. Поэтому полученные показатели характеризуют эффективность каждой постановки в целом и не рассматриваются как изолированная оценка влияния способа задания управляющих воздействий.

Заключение

Результаты вычислительных экспериментов показали, что в рассматриваемых условиях динамическая конфигурация, основанная на непосредственном формировании управляющих моментов ротора и маятника, обеспечила более высокие показатели успешности достижения цели, эффективности траектории по сравнению с кинематической конфигурацией и меньшую целевую область.

Также при динамическом управлении выявлен начальный переходный процесс, сопровождающийся колебаниями маятника, кратковременным нарушением устойчивости движения и увеличением длины траектории. Для ограничения подобных режимов введено досрочное завершение эпизода при отклонении маятника более чем на 90°, что позволило исключать состояния, не соответствующие допустимому режиму движения.

Дальнейшие исследования предполагают оценку разработанных постановок при движении по неровным поверхностям, проведение экспериментов на физическом прототипе и сравнительный анализ других методов обучения с подкреплением, включая Proximal Policy Optimization (PPO) [11], применимый к задачам непрерывного управления робототехническими системами.

Список литературы

1. Zvonarev I.S., Karavaev Y.L. Deep reinforcement learning for mobile robot control for motion toward a given position // Robotics and Autonomous Systems. 2026. Vol. 200. Art. 105392.

2. Lin Y. et al. Efficient TD3 based path planning of mobile robot in dynamic environments using prioritized experience replay and LSTM //Scientific Reports. 2025. Т. 15. №. 1. С. 18331.

3. Ivanova T.B., Karavaev Y.L., Kilin A.A. Control of a pendulum-actuated spherical robot on a horizontal plane with rolling resistance //Archive of Applied Mechanics. 2022. Т. 92. №. 1. С. 137–150.

4. Ivanova T.B., Kilin A.A., Pivovarova E.N. Controlled motion of a spherical robot with feedback. I // Journal of Dynamical and Control Systems. 2018. Т. 24. №. 3. С. 497–510.

5. Ivanova T.B., Kilin A.A., Pivovarova E.N. Controlled motion of a spherical robot with feedback. II // Journal of Dynamical and Control Systems. 2019. Т. 25. №. 1. С. 1–16.

6. Alexey B. et al. Stabilization of the motion of a spherical robot using feedbacks // Applied Mathematical Modelling. 2019. Т. 69. С. 583–592.

7. Kilin A.A., Karavaev Y.L. Experimental research of dynamic of spherical robot of combined type //Russian Journal of Nonlinear Dynamics. 2015. Т. 11. №. 4. С. 721–734.

8. Karavaev Y.L., Kilin A.A. Nonholonomic Dynamics and Control of a Spherical Robot with an Internal Omniwheel Platform: Theory and Experiments, Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics. 2016. Vol. 295. P. 158–167 DOI: 10.1134/S0081543816080095

9. Fujimoto S., Hoof H., Meger D. Addressing function approximation error in actor-critic methods //International conference on machine learning. PMLR. 2018. С. 1587–1596.

10. Haarnoja T., Zhou A., Abbeel P., Levine S. Soft actor-critic: Off-policy maximum entropy deep reinforcement learning with a stochastic actor // Proceedings of the 35th International Conference on Machine Learning. PMLR. 2018. P. 1861–1870.

11. Schulman J., Wolski F., Dhariwal P., Radford A., Klimov O. Proximal policy optimization algorithms // arXiv preprint arXiv:1707.06347. 2017.

12. Anderson P., Chang A. X., Chaplot D. S. et al. On Evaluation of Embodied Navigation Agents // arXiv preprint. 2018. arXiv:1807.06757. DOI: 10.48550/arXiv.1807.06757.

13. Kober J., Bagnell J. A., Peters J. Reinforcement learning in robotics: A survey // The International Journal of Robotics Research. 2013. Vol. 32. No. 11. P. 1238–1274. DOI: 10.1177/0278364913495721.

14. Levine S., Finn C., Darrell T., Abbeel P. End-to-End Training of Deep Visuomotor Policies // Journal of Machine Learning Research. 2016. Vol. 17, No. 39. P. 1–40.

15. Kalashnikov D. et al. Scalable Deep Reinforcement Learning for Vision-Based Robotic Manipulation // Proceedings of the 2nd Conference on Robot Learning. PMLR. 2018. Vol. 87. P. 651–673.

16. Hwangbo J. et al. Learning Agile and Dynamic Motor Skills for Legged Robots // Science Robotics. 2019. Vol. 4. No. 26. Art. eaau5872. DOI: 10.1126/scirobotics.aau5872.

17. Sun C. et al. Fully Autonomous Real-World Reinforcement Learning with Applications to Mobile Manipulation // Proceedings of the 5th Conference on Robot Learning. PMLR. 2022. Vol. 164. P. 308–319.

18. Karavaev Y.L., Kilin A.A. The Dynamics and Control of a Spherical Robot with an Internal Omniwheel Platform // Regular and Chaotic Dynamics. 2015. Vol. 20. No. 2. P. 134–152. DOI: 10.1134/S1560354715020033

19. Nor N. V., Reinforcement Learning in the Task of Spherical Robot Motion Control, Rus. J. Nonlin. Dyn. 2024. Vol. 20. No. 2. P. 295–310.

Н.Н. СВИРИДОВ[1], Н.И. БАЗЕНКОВ[2,3]
[1]МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет
[2]Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН, Москва
[3]Московский инженерно-физический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный
nikswirlo@gmail.com

УПРАВЛЕНИЕ СКЕЛЕТНО-МЫШЕЧНОЙ МОДЕЛЬЮ ЧЕЛОВЕКА НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ ОБУЧЕНИЯ С ПОДКРЕПЛЕНИЕМ

Рассматривается задача управления скелетно-мышечной моделью полного тела человека. Цель управления – повторять заданное движение. Лучший из существующих обученных агентов, Kinesis, основан на архитектуре MLP (multi-layer perceptron). Мы предлагаем метод обучения агента на основе трансформерной архитектуры. Разработана среда MyoHuman, включающая в себя модель полного тела (338 мышц, 86 степеней свободы) и набор движений для обучения (2 822 траектории, около 7,5 ч) из архива AMASS. Предложена трёхэтапная схема обучения, основанная на постепенном переходе от копирования поведения предобученной стратегии управления нижними конечностями к управлению полнотелой моделью. Выполнены эксперименты по дистилляции обученного MLP агента в агента с трансформерной архитектурой. Предложен подход грануляции пространства наблюдений и действий (мышц) с целью снижения размерности. Обученный агент управляет всеми 338 мышцами и достигает Success Rate 45 %, Frame Coverage 68 % и средней ошибки положения отслеживаемых точек 6,1 см, а дистилляция в трансформер выходит на уровень MLP-учителя за 240 эпох обучения. Полученная модель может применяться для создания виртуальных двойников опорно-двигательного аппарата человека в медицинских или спортивных приложениях.

Ключевые слова: *обучение с подкреплением, скелетно-мышечные модели, имитация движений, трансформер, грануляция, curriculum learning*.

Введение

Управление движениями человека представляет собой одну из наиболее сложных задач управления: нервная система координирует работу более 600 мышц, обеспечивая устойчивую локомоцию и взаимодействие с объек-

тами [1]. Изучение принципов этой координации востребовано в нейрофизиологии, реабилитационной медицине, проектировании протезов и экзоскелетов.

Классические гуманоидные роботы управляются за счет крутящих моментов в суставах, что удобно для моделирования, однако не учитывает основные особенности мышечно-сухожильного аппарата. Параллельно развивается направление мышечно-скелетных роботов, в которых сходные задачи решаются на реальном железе: предложены методы обучения схемы тела на основе физически информированных нейронных сетей [11], а также конструкции искусственных мышц с анизотропной гибкой структурой [12]. В последние годы активно развиваются модели мышечного управления на основе модели Хилла, реализованные в среде MyoSuite [2]. Такой подход приближает нас к реалистичному моделированию движений человека, однако существенно усложняет задачу управления. Пространство действий возрастает с десятков моментов в суставах до сотен мышечных активаций.

Методы обучения с подкреплением (RL) продемонстрировали значительные успехи в высокоразмерных задачах управления, в том числе в управлении гуманоидными роботами [3]. Применительно к скелетно-мышечным моделям существуют решения, частично решающие задачу локомоции. В работе Kinesis [4] используется архитектура на основе смеси MLP экспертов. Обучается стратегия управления мышцами нижних конечностей и торса (290 мышц) и показывается эффективность предварительного обучения на задаче имитации движений. В работе Arnold [5] впервые применена архитектура трансформера к задаче управления мышцами и продемонстрирована возможность построения единой политики, работающей с разными конфигурациями тела, однако исследование ограничено моделями тела, включающими не более ≤ 80 мышц.

На текущий момент отсутствуют эффективные стратегии, обученные управлять всем телом, включающим ноги, туловище и руки. Более того, все известные открытые стратегии, способные управлять наиболее полными конфигурациями тела (290 мышц), опираются на архитектуру MLP, что затрудняет их модификацию для новых движений или расширение на конфигурации тела с большим количеством мышц и степеней свободы.

Целью нашей работы является обучение агента на основе трансформерной архитектуры, способного управлять локомоцией человека. Гибкость по входам и выходам – ключевое преимущество трансформеров – позволяет масштабировать агента, дообучать под новые задачи и исследовать в произвольных конфигурациях тела. Это особенно ценно для задач протезирования и моделирования специфических ситуаций в медицине.

Среда MyoHuman

Нами разработана модель полного тела в открытой среде MyoSuite [2]. Модели в MyoSuite описывают отдельные части тела: MyoHand (кисть), MyoTorso (торс) и MyoLeg (нижние конечности). В настоящей работе была собрана модель полного тела MyoHuman[1] в формате MJCF, объединяющая эти компоненты в единую кинематическую структуру (рис. 1).

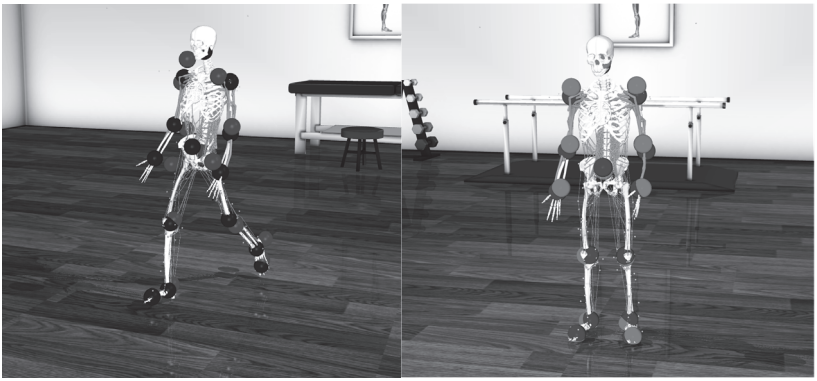


Рис. 1. Визуализация скелета MyoHuman в момент имитации референсного движения. Точки на суставах – 14 отслеживаемых положений

Итоговая модель содержит 45 костей (твердых тел), 81 сустав (86 степеней свободы) и 338 мышц. Кисти исключены, поскольку в данной работе фокус смещен на глобальные локомоторные навыки. Состояние модели задаётся вектором обобщённых координат $q \in \mathbb{R}^{807}$ и вектором мышечных активаций $\alpha \in [0, 1]^{338}$. Динамика мышц описывается моделью Хилла; для каждого сустава заданы анатомические ограничения на допустимый диапазон углов. Ограничения модели: исключены кисти рук, шея и голова жёстко зафиксированы относительно груди. Управляющий сигнал подаётся с частотой 30 Гц, частота физической симуляции составляет 150 Гц.

В качестве источника обучающих движений используется поднабор KIT [8] из архива AMASS [7]. Использовались разнообразные движения: ходьба вперёд и назад, развороты, бег, наклоны, прыжки, броски, жестикуляция руками, например, игра на скрипке. Полученный набор включает

[1] https://github.com/nikswir/Myohuman.

2 822 траектории общей длительностью около 7,5 ч в параметризации модели тела SMPL [9]. Данные были переведены в координаты точек модели с помощью решения задачи обратной кинематики.

Задача управления

Задача рассматривается как марковский процесс принятия решений (MDP) $M = \langle S, A, T, R, \gamma \rangle$, где S – пространство состояний скелетно-мышечной модели, A – пространство мышечных активаций, $T: S \times A \to S$ – функция перехода, задаваемая симулятором, $R: S \times A \to \mathbb{R}$ – функция вознаграждения, $\gamma \in [0, 1)$ – коэффициент дисконтирования.

Наблюдение агента $o^t \in \mathbb{R}^{807}$ состоит из 681 наблюдений проприоцептивной части: позиции и ориентации суставов, линейные и угловые скорости 45 тел, контакты стоп и 126 компонент задачной части: разности позиций и скоростей, а также референсные позиции отслеживаемых точек. Отслеживались 14 ключевых точек: таз, голова, голени, лодыжки, положение пальцев стопы, плечо, предплечье и запястье.

Все величины выражены в локальной системе координат корневого сустава, что обеспечивает инвариантность наблюдений относительно положения и ориентации тела в мире. Действие $a^t \in [-1, 1]^{338}$ – управляющий сигнал, линейно преобразуемый средой в физиологические мышечные активации.

Политика агента задаётся условным распределением $\pi_\theta(a^t \mid o^t)$, параметризованным нейронной сетью с параметрами θ. Максимизируемый в работе критерий - ожидаемый дисконтированный суммарный доход:

$$J(\theta) = E_{\pi\theta}[\sum_{t=0}^{T} \gamma^t r_t] \to max_\theta, \quad (1)$$

где r^t – вознаграждение на шаге *t,* а T — длительность эпизода.

Задача обучения состояла в том, что агент должен управлять скелетно-мышечной моделью так, чтобы повторить заданное движение. Качество движения на шаге *t* оценивалось следующей функцией вознаграждения:

$$r_t = w_{pos} r_t^{pos} + w_{vel} r_t^{vel} - w_e c_t^e \ . \quad (2)$$

Первая компонента r_t^{pos} – вознаграждение за совпадение позы агента с целевым движением:

$$r_t^{pos} = exp(-k_{pos} \frac{1}{3N} \sum_i \left\| p_{t+1}^i - \hat{p}_{t+1}^i \right\|^2) \ , \quad (3)$$

где p_{t+1}^i – поза после выполнения действия на шаге *t*, $\hat{p}_{t+1}^i$ – целевая поза, k_{pos} – коэффициент масштаба.

Вознаграждение за совпадение скоростей вводится аналогично:

$$r_t^{vel} = exp(-k_{vel}\frac{1}{3N}\sum_i \left\| v_{t+1}^i - \hat{v}_{t+1}^i \right\|^2), \quad (4)$$

где v_{t+1}^i, $\hat{v}_{t+1}^i$ – фактическая и целевая скорость отслеживаемых точек.

Третья компонента – штраф за чрезмерную мышечную активацию a_t:

$$c_t^e = \|a_t\|_1 + \|a_t\|_2. \quad (5)$$

Здесь суммирование ведётся по $N = 14$ отслеживаемым точкам, а множитель $1/(3N)$ соответствует усреднению квадратов покомпонентных отклонений по точкам и трём пространственным координатам. Штраф c_t^e вычисляется по вектору мышечных активаций и усредняется по подшагам симуляции. Использованные значения коэффициентов: $w_{pos} = 0{,}7$, $w_{vel} = 0{,}3$, $w_e = 0{,}002$, $k_{pos} = 200$, $k_{vel} = 5$.

Трёхэтапная схема обучения

Рассматриваемая задача решается методами обучения с подкреплением. Используется алгоритм Proximal Policy Optimization (PPO) [6]. Во-первых, PPO устойчив в задачах непрерывного управления высокой размерности. Во-вторых, PPO используется в работах DeepMimic [3], Kinesis [4] и Arnold [5], что обеспечивает прямую сопоставимость полученных результатов с этими работами. В-третьих, первый этап предлагаемой схемы основан на копировании поведения учителя в режиме on-policy behavior cloning, что естественно сочетается с on-policy оптимизацией на последующих этапах.

Попытки обучения MLP и трансформера с нуля показали, что ни одна из архитектур не достигает качественной имитации движений. Обучение сходится в локальный оптимум: агент удерживает стоячую позу и не совершает первого шага. Причина в размытии позиционной награды: только 6 отслеживаемых точек относятся к ногам. Трансформер требует на порядок больше вычислительных ресурсов: одна эпоха PPO занимает около 163 с вместо 16 с у MLP, а также имеет меньшую скорость сходимости, что делает непрактичным обучение такой архитектуры с нуля.

Для решения проблемы локального оптимума была предложена трёхэтапная схема обучения, реализующая принцип curriculum learning [10]. На всех этапах используется один MLP-агент со скрытыми слоями размером 2048, 1536, 1024, 1024, 512, 512 нейронов и функцией активации SiLU. Веса сети последовательно наследуются между этапами. Параметры схемы по этапам приведены в табл. 1.

На первом этапе MLP-агент обучается методом On-Policy Behavior Cloning (OBC) [5] воспроизводить действия предобученной политики Kinesis [4] в среде MyoHuman. Поскольку Kinesis выдаёт активации только для 290 мышц ног, спины и торса, целевой вектор действий дополняется 48 нулевыми компонентами, соответствующими мышцам рук.

Таблица 1

Параметры среды и агента в трёхэтапной схеме

Этап	Завершение эпизода по рукам	Инициализация рук	Веса награды для рук	Веса голов активаций рук
Этап 1 (OBC)	Отключена	Опущены	0	Фиксированы в нуле
Этап 2 (PPO soft)	1 м	Опущены	×0,5	Обучаются с нуля
Этап 3 (PPO)	0,15 м	Из референса	×1	Дообучаются со 2 этапа

На втором этапе агент учился управлять руками. Среда остаётся смягчённой: порог завершения эпизода по рукам устанавливается в 1 м, веса позиционной и скоростной награды для рук задаются вдвое меньшими. Такая настройка позволяет политике начать исследовать управление верхними конечностями, не разрушая перенесённый навык локомоции.

На третьем этапе все смягчения относительно рук снимаются: используется стандартная инициализация поз из целевых траекторий, веса награды выравниваются, порог завершения устанавливается равным 0,15 м для всех 14 отслеживаемых точек.

Для оценки качества имитации движений используются следующие метрики.

Success rate – доля траекторий, воспроизведённых до конца без досрочного завершения эпизода. Досрочное завершение наступает, как только отклонение хотя бы одной из 14 отслеживаемых точек от референсного положения превышает порог $d^{term} = 0{,}15$ м.

Средняя ошибка положения E_{MPJPE} – усреднённое по кадрам отклонение 14 отслеживаемых точек от референсных:

$$E_{MPJPE} = \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left\| p_t^i - \hat{p}_t^i \right\| . \qquad (6)$$

Frame Coverage – усреднённая по эпизодам доля кадров траектории, воспроизведённых до завершения эпизода.

На рис. 2, 3 приведена динамика метрик качества на всех этапах обучения MLP-агента с нуля. Итоговые метрики приведены в табл. 2.

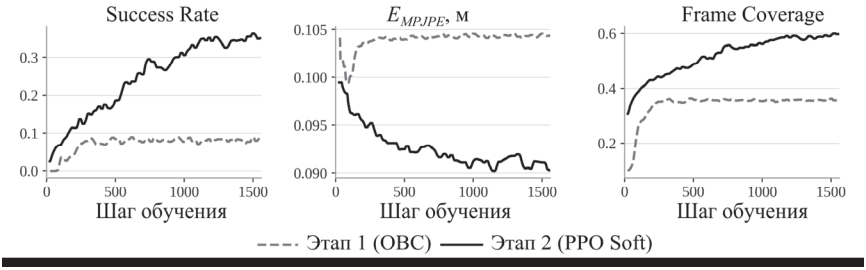


Рис. 2. Динамика метрик качества имитации для 1 и 2 этапов трехэтапной схемы на отложенной выборке

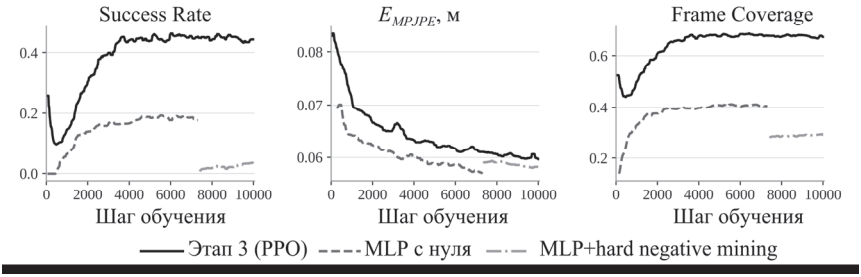


Рис. 3. Динамика метрик качества имитации для 3-го этапа трехэтапной схемы и обучения MLP с нуля на отложенной выборке

Таблица 2

Метрики качества имитации по этапам

Этап	Success Rate ↑	Frame Coverage ↑	E_{MPJPE}, см ↓
MLP с нуля	0,17	0,41	5,8
Этап 1 (ОВС)	0,08	0,35	10,4
Этап 2 (PPO soft)	0,36	0,60	9,0
Этап 3 (PPO)	0,45	0,68	6,1

Полученный MLP-агент управляет всеми 338 мышцами и может быть использован в качестве первого специализированного эксперта в процедуре hard negative mining [3].

Трансформер: грануляция токенов и архитектурные решения

Главное ограничение MLP-агента – жёсткая привязка к фиксированной размерности входа и выхода: при изменении конфигурации тела сеть требует переобучения. Трансформер [5] же оперирует независимыми токенами и поддерживает произвольные конфигурации, что особенно важно для задач протезирования. Мы использовали собственную реализацию[2] архитектуры Arnold [5]. Однако прямое применение этой архитектуры к среде MyoHuman порождает $n_s > 800$ сенсорных и $n_m = 338$ моторных токенов; поскольку сложность механизма внимания квадратично зависит от размерностей пространства наблюдений и действий:

$$O(n_s^2) + O(n_m^2) + O(n_s n_m). \quad (7)$$

Время, необходимое на вычисление действий в рамках 1 эпохи, становится слишком большим.

Для решения этой проблемы в работе предложена **грануляция токенов** – объединение близких по смыслу элементов наблюдений и действий в группы, представляемые одним токеном. Рассматриваются три режима грануляции наблюдений: без грануляции, *по спецификации* (объединение по типу величины внутри одного тела) и *по телу* (все скаляры одного тела в один токен). Для действий рассматриваются три стратегии разбиения мышц на группы: *анатомическая* (фасции одной мышцы), *функциональная* (по суставной функции – сгибатели, разгибатели и т.д.) и *гибридная* (комбинация).

Для отображения групповых моторных токенов обратно в пространство мышечных активаций предлагаются две стратегии.

1. **Иерархический декодер**, построенный из блоков двух типов. Блок group-to-group (G2G) реализует взаимодействие между мышечными группами через self-attention и cross-attention к выходу кодировщика; стоимость $O(G^2) + O(Gn_s)$. Блок within-group (WG) вводит токены отдельных мышц внутри каждой группы и применяет self-attention между токенами мышц одной группы и токеном этой группы из последнего G2G блока. Таким образом, архитектуры в которых последним из блоков стоит WG блок, решают эту проблему.

[2] https://github.com/nikswir/Arnold.

2. **MLP головы** – если последним блоком в архитектуре является G2G блок то на выходе используются MLP-головы расширения, которые заключаются в том чтобы отобразить финальное скрытое представление токена группы в вектор активаций мышц данной группы.

Для исследования эффективности предложенных решений MLP-агент со стадии 3 дистиллировался в трансформер по схеме OBC (On-Policy Behavior Cloning). Сравнивались конфигурации, различающиеся типом грануляции наблюдений, грануляции действий, архитектурой декодера. Результаты приведены в таблице 4.

Наилучшую сходимость показывает конфигурация с грануляцией наблюдений по телу, функциональной грануляцией действий и декодером G2G+MLP. Её результаты: 240 эпох до целевого порога SR, $L_{\text{OBC}} = 0{,}154$. Иерархический декодер G2G×5 + WG при функциональной грануляции даёт качество $L_{\text{OBC}} = 0{,}160$ при наименьшем времени эпохи 54,3 с.

Выводы

В работе рассматривалась задача управления биомеханической моделью тела человека, включающей верхние и нижние конечности. Решение этой задачи управления позволит строить виртуальные модели движений человека для задач медицины или спортивных тренировок.

Целью работы было исследовать применимость методов обучения с подкреплением для обучения агента на основе трансформерной архитектуры, которая позволяет в дальнейшем масштабировать результаты для новых видов движений.

Предложена и реализована среда MyoHuman, охватывающая большую часть тела человека: 338 мышц в 4 конечностях. Подготовлен обучающий набор движений из 2 822 траекторий.

Предложена трёхэтапная схема обучения, реализующая перенос локомоторного навыка из предобученного агента Kinesis постепенным включением мышц рук. Полученный агент управляет всеми 338 мышцами и достигает Success Rate 45 %, Frame Coverage 68 % и средней ошибки положения суставов 6,1 см.

Для обучения агента на основе трансформерной архитектуры управлению моделью всего тела с сотнями мышц предложен подход на основе грануляции токенов наблюдений и действий. Проведена дистилляция MLP-агента в трансформер и показано, что лучшие конфигурации достигают порога качества MLP-учителя за 240 эпох обучения, а иерархический декодер G2G×5 + WG даёт наилучшее время 1 эпохи обучения, равное 54 с при сопоставимом качестве.

Программа дальнейших исследований включает обучение набора специализированных экспертов на различных подмножествах движений и их дистилляцию в единого агента, а также исследование применимости полученной модели в специализированных задачах реабилитации, протезирования и адаптации под индивидуальные конфигурации тела.

Список литературы

1. Bernstein N.A. The Co-ordination and Regulation of Movements. Oxford: Pergamon Press, 1967.

2. Caggiano V., Wang H., Durandau G., Sartori M., Kumar V. MyoSuite: A Contact-Rich Simulation Suite for Musculoskeletal Motor Control // Proc. of the 4th Annual Learning for Dynamics and Control Conference (L4DC). 2022. P. 492–507.

3. Peng X.B., Abbeel P., Levine S., van de Panne M. DeepMimic: Example-Guided Deep Reinforcement Learning of Physics-Based Character Skills // ACM Transactions on Graphics. 2018. V. 37. No 4. Article 143.

4. Simos M., Chiappa A.S., Mathis A. Reinforcement Learning-Based Motion Imitation for Physiologically Plausible Musculoskeletal Motor Control. arXiv:2503.14637, 2025.

5. Chiappa A.S., An B., Simos M., Li C., Mathis A. Arnold: A Generalist Muscle Transformer Policy. arXiv:2508.18066, 2025.

6. Schulman J., Wolski F., Dhariwal P., Radford A., Klimov O. Proximal Policy Optimization Algorithms. arXiv:1707.06347, 2017.

7. Mahmood N., Ghorbani N., Troje N.F., Pons-Moll G., Black M.J. AMASS: Archive of Motion Capture as Surface Shapes // Proc. of the IEEE/CVF International Conference on Computer Vision (ICCV). 2019. P. 5442–5451.

8. Plappert M., Mandery C., Asfour T. The KIT Motion-Language Dataset // Big Data. 2016. V. 4. No 4. P. 236–252.

9. Loper M., Mahmood N., Romero J., Pons-Moll G., Black M.J. SMPL: A Skinned Multi-Person Linear Model // ACM Transactions on Graphics. 2015. V. 34. No 6. Article 248.

10. Bengio Y., Louradour J., Collobert R., Weston J. Curriculum Learning // Proc. of the 26th International Conference on Machine Learning (ICML). 2009. P. 41–48.

11. Kawaharazuka K., Hattori T., Yoneda K., Okada K. PIMBS: Efficient Body Schema Learning for Musculoskeletal Humanoids with Physics-Informed Neural Networks // IEEE Robotics and Automation Letters. 2025. arXiv:2506.20343.

12. Yoshimura S., Miki A., Miyama K., Sahara Y., Kawaharazuka K., Okada K., Inaba M. Patterned Structure Muscle: Arbitrary Shaped Wire-driven Artificial Muscle Utilizing Anisotropic Flexible Structure for Musculoskeletal Robots // 2024 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems (IROS). 2024. P. 13930–13937.

Р.Э. ЛЯТИФОВ
МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва
relyatifov@mail.ru

ЗНАНИЕВЫЙ И ИНТЕГРАЦИОННЫЙ ДЕФИЦИТ: ДИАГНОСТИКА УЗКОГО МЕСТА ПЕРЕНОСА У АГЕНТА С МОДЕЛЬЮ МИРА

Когда агент с моделью мира не справляется с задачей, требующей нового элемента среды, узким местом может быть либо нехватка данных (модель неверна относительно элемента – знаниевый дефицит), либо нехватка вычислений на планирование (модель верна, но элемент не задействован – интеграционный дефицит). Им соответствуют разные по стоимости средства: сбор данных против перепланирования. На популяции из 320 агентов со случайными бюджетами данных и вычислений в стохастической среде показано, что оба режима возникают самопроизвольно, а дешёвый критерий K(X) предсказывает узкое место с AUC 0,913 (95 % ДИ [0,859; 0,960]) и точностью 0,863 на отложенной выборке, при пороге, выбранном на непересекающейся обучающей части. Проверка проведена вмешательством: назначенное правилом средство восстанавливает перенос у 88 % отложенных провальных агентов. Результат даёт практическое правило выбора между сбором данных и пересчётом.

Ключевые слова: *обучение с подкреплением, модель мира, перенос, диагностика узкого места, ROC-анализ, планирование.*

Введение

Агенты, обучающие внутреннюю модель среды, широко применяются для планирования и переноса [1]. Типичная трудность состоит в том, что при появлении нового элемента среды – инструмента, препятствия, механизма – агент продолжает проваливать задачи, требующие этого элемента, даже после длительного обучения. Перед исследователем встаёт практический вопрос: необходимо ли собирать дополнительные данные, что требует дорогостоящего взаимодействия со средой, или это излишне.

Стандартные показатели не дают ответа. Низкое вознаграждение наблюдается и тогда, когда модель ошибочна, и тогда, когда модель верна, но не используется. Точность модели сама по себе также недостаточна: вы-

сокая точность не гарантирует, что соответствующее знание доходит до поведения. Отсутствует средство атрибуции узкого места, а вместе с ним – обоснованного выбора корректирующего действия.

Близкие вопросы рассматривались раздельно. Понятие овладения (empowerment) [2, 3] вводит теоретико-информационную меру управляемости, используемую как сигнал внутренней мотивации, а не как диагностику. Теория аффордансов в обучении с подкреплением [4] описывает, какие действия доступны в состоянии, но не разделяет причины, по которым доступное действие не используется. Анализ соотношения ошибки модели и ошибки планирования [1, 5, 6] различает два источника ошибки, однако, как правило, без проверяемого вмешательством правила выбора корректирующего действия.

Практическая значимость обусловлена резкой асимметрией стоимости. Сбор данных требует взаимодействия со средой и дорог в робототехнике и физическом моделировании, где каждый образец стоит секунд реального времени или износа оборудования [5, 6]. Перепланирование на уже выученной модели является вычислением и сравнительно дёшево. Ошибочный диагноз ведёт либо к напрасному сбору данных там, где хватило бы пересчёта, либо к бесплодному дообучению там, где связывающим ограничением являются вычисления. Поэтому даже грубое, но надёжное правило атрибуции имеет прямую практическую ценность.

Вклад работы состоит в следующем. Во-первых, различение знаниевого и интеграционного дефицита формулируется как вопрос о том, какой ресурс является связывающим ограничением. Во-вторых, вводится дешёвый диагностический критерий и правило назначения, порог которого выбирается из данных. В-третьих, правило проверяется вмешательством: проверяется, что назначаемое им средство действительно восстанавливает перенос, причём на агентах, не участвовавших в выборе порога.

Постановка задачи

Пусть агент с выученной моделью переходов планирует поведение в марковском процессе принятия решений, и пусть X – элемент среды, необходимый для класса задач. Различаем два узких места. *Знаниевый дефицит* означает, что модель неверно описывает динамику X, вследствие чего планирование опирается на ошибочные переходы и не приводит к цели независимо от бюджета планировщика. *Интеграционный дефицит* означает, что модель верна, но X не доходит до поведения: при имеющемся бюджете планирования ценность не распространяется до состояний, в которых X был бы использован.

Каждому узкому месту соответствует своё средство: знаниевому – новые данные, интеграционному – перепланирование без новых данных. Введём дешёвый критерий K(X) – нижнюю доверительную оценку усвоенного эффекта элемента (формула 1):

$$K(X) = E_{(s,a)\in K(X)}\left[\hat{p} - \frac{c}{\sqrt{n}}\right]. \quad (1)$$

Здесь K(X) – множество пар «состояние – действие», взаимодействующих с X, по которым у агента есть хотя бы одно наблюдение; $\hat{p}$ – предсказанная моделью вероятность характерного эффекта X после такого перехода; n – число наблюдений пары; c – коэффициент неуверенности. Вычитание поправки существенно: при малом числе наблюдений одиночная удачная сработка не должна засчитываться как знание, поэтому используется нижняя доверительная оценка, а не точечная. Чувствительность результата к выбору c приведена в разделе «Устойчивость».

Правило назначения вычислимо без знания истинной причины (формула 2):

если $K(X) < \theta$ (*знаниевый дефицит) – собрать данные;*

иначе (интеграционный дефицит) – перепланировать (2)

Порог θ выбирается из данных, а не назначается априори, и – что существенно – выбирается на обучающей части агентов, не пересекающейся с той, на которой затем сообщается качество. Гипотеза формулируется в интервенционных, а не корреляционных терминах. Этот выбор намеренный: корреляция критерия с успешностью была бы отчасти артефактом определений, поскольку обе величины вычисляются по одной и той же выученной модели, тогда как вмешательство устанавливает, что назначаемое средство является действующим. Гипотеза опровержима: если назначаемое средство не превосходит альтернативное на отложенных агентах, правило неверно.

Метод

Среда – дискретный мир из двух залов, разделённых стеной (рис. 1). Рычаг X открывает мост в стене; цели расположены в дальнем зале и без рычага недостижимы. В отличие от детерминированной постановки, рычаг открывает мост стохастически с вероятностью 0,7, вследствие чего оценка K(X) непрерывна и зашумлена, а не бинарна. Агент строит табличную модель переходов по частотам посещений и планирует итерацией по ценности; исследование обеспечивается оптимистической инициализацией непосещённых пар.

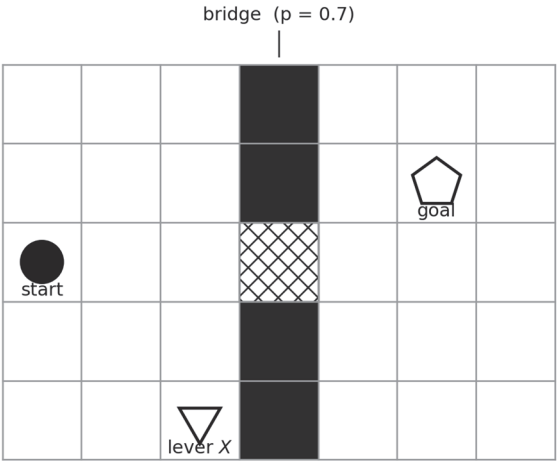


Рис. 1. Среда. Рычаг X открывает мост с вероятностью 0,7;
цели в дальнем зале без него недостижимы

Дефициты не задаются вручную, а возникают самопроизвольно. Сформирована популяция из 320 агентов с независимо выбранными бюджетами данных (число эпизодов исследования) и вычислений (число итераций планирования). В зависимости от сочетания бюджетов агент оказывается в том или ином режиме. Истинное узкое место не фиксируется заранее: оно определяется апостериорно по тому, какое вмешательство восстанавливает работоспособность.

Два вмешательства изолируют нехватку конкретного ресурса. Перепланирование выполняет полный пересчёт ценности на текущей модели без каких-либо новых данных. Сбор данных выполняет дополнительное взаимодействие со средой с последующим полным пересчётом, так что это вмешательство не смешивается с остаточной нехваткой вычислений. Агент считается провальным при развёртывании, если успешность при его собственных бюджетах ниже 0,5, и восстановленным, если вмешательство поднимает её выше 0,7.

Качество диагностики оценивается как качество классификации «достаточно ли перепланирования» по критерию K(X). Провальные агенты случайным образом делятся на обучающую половину (n = 146) и отложенную (n = 146). Порог θ выбирается на обучающей половине по критерию Юдена;

все сообщаемые величины – AUC, точность, чувствительность, специфичность и доли восстановления – вычисляются на отложенной половине. Доверительные интервалы получены бутстрэпом отложенных агентов (2000 повторений) при фиксированном пороге.

Детали реализации. Состояние – положение в решётке и бинарный признак открытости моста. Коэффициент дисконтирования 0,97, горизонт эпизода 90 шагов, эпсилон исследования 0,25. Бюджеты данных выбираются из множества {2, 3, 4, 6, 10, 16, 24, 40, 70, 120} эпизодов, бюджеты планирования – из {1, 2, 3, 4, 6, 10, 25, 300} итераций; вмешательство «данные» добавляет 90 эпизодов, полный пересчёт использует 300 итераций. Успешность усредняется по 12 стохастическим прогонам для каждой из восьми целей дальнего зала, отличных от цели, использовавшейся при исследовании. Коэффициент неуверенности в основном запуске c = 1. Все начальные значения генератора случайных чисел фиксированы; исходный код, значения всех гиперпараметров и скрипт, воспроизводящий каждое число и каждый рисунок работы, общедоступны (см. заключение).

Результаты

Из 320 агентов 292 не справляются при развёртывании. Два режима возникают самопроизвольно и в сопоставимых долях: перепланирования достаточно в 49 % случаев провала (интеграционный дефицит), остальным требуются новые данные (знаниевый дефицит). Распределение K(X) по двум истинным режимам (рис. 2) показывает естественное расслоение с реальным перекрытием у границы.

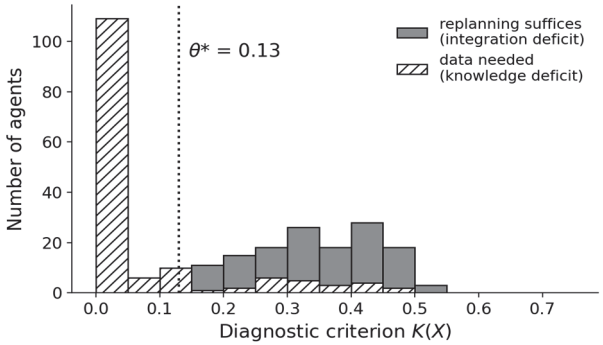


Рис. 2. Распределение критерия K(X) для двух самопроизвольно возникших режимов; пунктир – порог, выбранный на обучающей части

На отложенной выборке K(X) предсказывает достаточность перепланирования с AUC 0,913 (рис. 3) при бутстрэп-интервале 95 % [0,859; 0,960]. Порог $\theta = 0{,}13$, выбранный на обучающей части, даёт точность 0,863 (95 % ДИ [0,808; 0,918]) при чувствительности 0,96 и специфичности 0,78. Поскольку порог выбран на непересекающихся агентах, эти оценки не завышены внутривыборочным подбором.

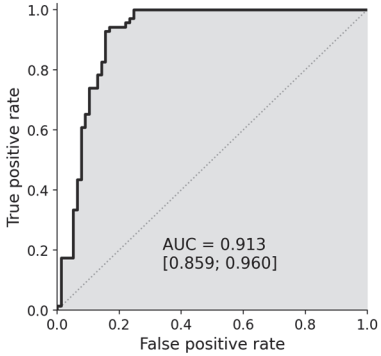


Рис. 3. ROC-кривая критерия K(X) при предсказании достаточности перепланирования, отложенная выборка

Применение правила (2) к отложенным агентам сведено в табл. 1. Среди агентов, помеченных как интеграционный дефицит, бесплатное перепланирование восстанавливает перенос в 80 % случаев; среди помеченных как знаниевый дефицит сбор данных восстанавливает его в 100 %. В совокупности единственное назначенное средство восстанавливает перенос у 88 % отложенных провальных агентов; остальные случаи суть ошибки у границы, что согласуется с AUC меньше единицы.

Таблица 1

Восстановление переноса под действием правила, отложенная выборка

Метка правила	Назначенное средство	Восстановлено
Интеграционный дефицит ($K \geq \theta$)	Перепланирование	80 %
Знаниевый дефицит ($K < \theta$)	Сбор данных	100 %

Содержательно менее очевидной является интеграционная половина результата: около половины всех провалов устраняется без каких-либо новых

данных, одним лишь пересчётом, и эти случаи надёжно опознаются по высокому значению K(X). Именно в такой ситуации сбор данных был бы напрасной тратой ресурсов.

Устойчивость и абляции

Три абляции проверяют, не зависит ли результат от конкретных значений параметров. В табл. 2 приведены AUC и точность на отложенной выборке при изменении коэффициента неуверенности c, стохастичности рычага и размера популяции.

Таблица 2

Абляции; все значения вычислены на отложенных выборках

Условие	Порог θ	AUC	Точность
c = 0,5	0,34	0,699	0,692
c = 1,0	0,13	0,913	0,863
c = 1,5	0,07	0,977	0,925
c = 2,0	0,01	0,983	0,973
p(откр.) = 0,5	0,12	0,979	0,961
p(откр.) = 0,7	0,12	0,982	0,921
p(откр.) = 0,9	0,15	0,980	0,934
p(откр.) = 1,0	0,29	0,988	0,947
Популяция n = 80	0,13	0,956	0,892
Популяция n = 160	0,12	0,914	0,890
Популяция n = 320	0,13	0,913	0,863

Следуют два наблюдения. Во-первых, диагностика не чувствительна к точной степени стохастичности: при вероятностях срабатывания рычага от 0,5 до 1,0 AUC на отложенной выборке остаётся выше 0,98, и детерминированный случай качественно не отличается от зашумлённых. Во-вторых, коэффициент c влияет, причём в интерпретируемом направлении: малое значение (AUC 0,70 при c = 0,5) слишком легко доверяет разреженным наблюдениям и относит плохо исследовавших агентов к «знающим», тогда как большие значения консервативнее и работают лучше (0,98 при c = 2,0). В качестве основного выбрано c = 1 как естественное значение, соответствующее одной стандартной ошибке; коэффициент намеренно не подбирался для максимизации сообщаемого результата. Изменение размера популяции меняет оценки лишь в пределах доверительных интервалов.

Зависимость качества классификации от порога показана на рис. 4. В окрестности выбранного значения кривая образует широкое плато, тогда как завышенные пороги ухудшают качество до уровня случайного угадывания. Результат, таким образом, не держится на точном значении единственного порога.

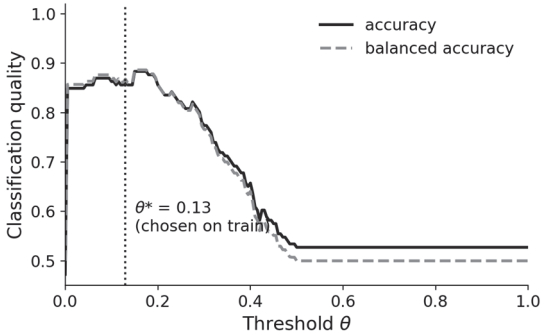


Рис. 4. Чувствительность качества классификации на отложенной выборке к порогу θ; пунктир – значение, выбранное на обучающей части

Обсуждение и ограничения

Практический рабочий процесс, вытекающий из результата, прост. Поскольку перепланирование почти бесплатно, при провале его следует выполнять первым; критерий K(X) заранее предсказывает, окажется ли пересчёт достаточным, и тем самым – требуется ли вообще дорогостоящее взаимодействие со средой. Высокое K(X) указывает на провал, ограниченный вычислениями, низкое – на провал, ограниченный данными.

От смежных работ подход отличается ролью используемой величины и способом проверки. В отличие от овладения [2, 3], мера применяется как диагностика провала, а не как внутренний драйв. В отличие от теории аффордансов [4], она разделяет две различные причины, по которым доступный элемент не используется. В отличие от анализа ошибок модели и планирования [1, 5, 6], предлагается правило назначения, проверенное вмешательством и на отложенных агентах.

Ограничения существенны и должны быть названы прямо. Среда табличная, малая и полностью наблюдаемая, а K(X) сформулирован для модели на основе частот; перенос критерия на нейросетевые модели мира требует замены частотной доверительной границы ансамблевой или байесовской оценкой неопределённости, что является естественным следующим шагом. Интеграционный дефицит индуцирован здесь усечением бюджета

планирования, хотя класс шире: устаревшая функция ценности после смены цели, недостаточная глубина поиска, не перенесённая на новую задачу политика – все они имеют ту же сигнатуру (адекватная модель при сохраняющемся провале) и устраняются пересчётом. Наконец, работа не охватывает смешанные дефициты, когда оба ресурса связывают одновременно; там качество диагностики ожидаемо снизится, и характеристика этого снижения оставлена для дальнейшей работы. Оценка на более богатых средах, таких как MiniGrid, и с нейросетевыми моделями является основным направлением продолжения.

Заключение

Показано, что провал переноса на задачах, требующих нового элемента среды, имеет два различимых узких места – знаниевое и интеграционное, – которым соответствуют разные и резко различные по стоимости средства: данные против перепланирования. Оба режима возникают самопроизвольно при случайном выборе бюджетов данных и вычислений. Дешёвый критерий K(X) предсказывает узкое место с AUC 0,913 и точностью 0,863 на отложенной выборке при пороге, выбранном на непересекающихся агентах, и правило проверено вмешательством: назначаемое им средство восстанавливает перенос у 88 % отложенных провальных агентов. Результат даёт практическое правило триажа, позволяющее решать, когда достаточно пересчёта, а когда действительно необходимы новые данные.

Исходный код, значения гиперпараметров и скрипт, воспроизводящий все приведённые числа и рисунки, доступны по адресу [7].

Список литературы

1. Sutton R.S., Barto A.G. Reinforcement Learning: An Introduction. 2nd ed. Cambridge: MIT Press, 2018. 552 p.

2. Klyubin A.S., Polani D., Nehaniv C.L. Empowerment: a universal agent-centric measure of control // IEEE Congress on Evolutionary Computation. 2005. Vol. 1. P. 128–135.

3. Mohamed S., Rezende D.J. Variational information maximisation for intrinsically motivated reinforcement learning // Advances in Neural Information Processing Systems. 2015. Vol. 28. P. 2125–2133.

4. Khetarpal K., Ahmed Z., Comanici G., Abel D., Precup D. What can I do here? A theory of affordances in reinforcement learning // Proceedings of the 37th International Conference on Machine Learning. 2020. Vol. 119. P. 5243–5253.

5. Janner M., Fu J., Zhang M., Levine S. When to trust your model: model-based policy optimization // Advances in Neural Information Processing Systems. 2019. Vol. 32. P. 12519–12530.

6. Moerland T.M., Broekens J., Plaat A., Jonker C.M. Model-based reinforcement learning: a survey // Foundations and Trends in Machine Learning. 2023. Vol. 16. No. 1. P. 1–118.

7. https://github.com/relyatifov/transfer-bottleneck-diagnosis.

Секция

Прикладные нейросетевые системы

О.Ю. МАРЬЯСИН, Л.И. ТИХОМИРОВ
Ярославский государственный технический университет
maryasinou@ystu.ru

ДОРАБОТКА ГЕНЕРАТИВНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ АНАЛИЗА АНОМАЛИЙ В ДАННЫХ ОБ ЭНЕРГОПОТРЕБЛЕНИИ

В работе описаны исследования по применению генеративных нейронных сетей для анализа аномалий в данных об энергопотреблении. Авторы попытались найти такие технические решения (архитектурные, в обучении моделей и другие), которые бы позволили генеративным нейронным сетям сравняться по точности с другими методами машинного обучения или даже превзойти их, как при анализе одиночных аномалий, так и при наличии коллективных аномалий.

Ключевые слова: *энергопотребление, анализ аномалий, генеративные нейронные сети, вариационные автоэнкодеры, трансформеры.*

Введение

Появление систем интеллектуального анализа данных об энергопотреблении может использоваться для детекции показаний, сильно отклоняющихся от нормы, то есть аномалий. В данных об энергопотреблении чаще всего встречаются следующие виды аномалий [1].

- Одиночные (точечные) аномалии (выбросы) данных. Это одиночные данные, которые резко отличаются от других данных и выходят за допустимые пределы. Одиночные аномалии в данных об энергопотреблении могут быть связаны с кратковременными перегрузками или отключениями от энергосети у энергопотребителей;
- Коллективные аномалии. Коллективные аномалии могут быть охарактеризованы как последовательности данных, имеющих похожий характер, но которые выходят за допустимые пределы. Коллективные аномалии могут быть связаны с длительными отключениями от энергосети, с кражами энергии и другими факторами.

Методы машинного обучения (МО), которые могут применяться для детекции аномалий в данных об энергогпотреблении, включают как методы обучения без учителя (unsupervised learning), так и методы обучения с учителем (supervised learning) [2]. Применение методов обучения с учителем ограничено на практике как из-за большой трудоемкости создания размеченных наборов данных об энергопотреблении, так и из-за того, что классы нормальных и аномальных данных сильно не сбалансированы, что оказывает влияние на результаты классификации. Исходя из этого, в данной работе рассматриваются только методы МО, обучаемые без учителя.

Ранее авторы провели детальное исследование применения различных статистических методов, методов МО и искусственных нейронных сетей (ИНС) для анализа одиночных аномалий в данных об энергопотреблении [3]. В [3] был рассмотрен 21 метод, включая методы на основе линейных моделей, методы на основе плотности, ансамблевые методы, вероятностные методы и методы на базе ИНС. В качестве набора данных для тестирования алгоритмов был использован набор данных LEAD1.0 [4]. Лучшими детекторами по результатам численных экспериментов оказались алгоритмы LODA (Lightweight On-line Detector of Anomalies) и HBOS (Histogram-based Outlier Score). В [5] для анализа одиночных аномалий было рассмотрено 6 методов только на базе генеративных нейронных сетей (ГНС). Применение ГНС основано на том, что обученные на большом количестве нормальных данных они будут давать значительную ошибку реконструкции при подаче на вход аномальных данных. Лучшими алгоритмами по результатам численных экспериментов оказались алгоритмы VAE (Variational AutoEncoder) и ALAD (Adversarially Learned Anomaly Detection).

Коллективные аномалии можно рассматривать как множество одиночных аномалий. Недостатком такого подхода является то, что методы, ориентированные на обнаружение одиночных аномалий, могут быть неэффективны для выявления коллективных аномалий. Большинство методов из рассмотренных авторами в [3] плохо справляются с анализом (сильно теряют точность) при наличии коллективных аномалий. Исключение составляют некоторые методы на основе плотности, такие как LOF (Local Outlier Factor) и ROD (Rotation-based Outlier Detection), которые лучше других показали себя при наличии коллективных аномалий. В то же время, они хуже других методов справились с детекцией одиночных аномалий.

ГНС, по мнению авторов, являются одними из наиболее перспективных видов алгоритмов анализа аномалий. Однако, как показали результаты численных экспериментов [3, 5], алгоритмы на базе ГНС пока сильно уступают

по точности обнаружения аномалий в данных об энергопотреблении другим методам МО. Целью данной работы был поиск таких технических решений (архитектурных, в обучении моделей и других), которые бы позволили ГНС сравняться по точности с другими методами МО или даже превзойти их. Так как, скорее всего, нет универсальной модели, которая одинаково хорошо выявляла бы и одиночные аномалии, и, при этом, хорошо работала в присутствии коллективных аномалий, то авторы решили разделить поиск на два направления. Первое направление связано с поиском или доработкой существующих ГНС для анализа одиночных аномалий. Второе направление – это поиск или доработка существующих ГНС, которые могли бы справляться с анализом при наличии коллективных аномалий.

Описание применяемых решений

В качестве одной из базовых архитектур ГНС, рассматриваемых в рамках первого направления, для анализа одиночных аномалий, была принята архитектура VAE. Эта ГНС показала наилучшую точность при детекции одиночных аномалий по сравнению с другими типами ГНС [5]. Далее будет описан комплекс технических решений, примененный авторами к классической архитектуре VAE, включающей энкодер и декодер на базе многослойного персептрона (Multilayer perceptron – MLP). Именно такой VAE был использован в [5] для детекции одиночных аномалий.

Авторами были проанализированы и опробованы различные технические решения, которые могли бы привести к повышению точности анализа одиночных аномалий. Сначала классический VAE был заменен на условный VAE (Conditional VAE – CVAE). CVAE по сравнению с VAE позволяет лучше учитывать контекст для каждой точки временного ряда. При этом аномалия определяется как точка, которая плохо восстанавливается именно в своём контексте, а не просто является выбросом относительно глобального распределения. Кроме того, классический VAE может давать высокую ошибку реконструкции на редких, но нормальных паттернах, из-за того, что они плохо представлены в обучающей выборке. Это приводит к ложным обнаружениям аномалий. CVAE за счёт условия сужает пространство возможных значений для каждого контекста. Сигнал условия (condition) передаётся как в энкодер, так и в декодер, что позволяет модели учитывать контекст (например, предыдущие значения) при формировании латентного представления и генерации.

Архитектура MLP, на которой основаны энкодер и декодер классического VAE была преобразована в более сложную нейросетевую архитектуру. Энкодер CVAE включает три параллельных ветки (пути).

- LSTM-путь, представленный двунаправленной сетью долгой краткосрочной памяти (Long Short Term Memory – LSTM). Выходные скрытые состояния последнего слоя для прямого и обратного направлений конкатенируются. Двунаправленная LSTM позволяет учитывать контекст как из прошлого, так и из будущего, что значительно улучшает качество представления при детекции аномалий, где важен контекст вокруг конкретной точки временного ряда.
- CNN-путь, представленный сверточной нейронной сетью (Convolutional NN – CNN), образованной последовательностью 1D свёрточных слоёв (Conv1d), слоев батч-нормализации (BatchNorm), слоев активации (ReLU) и слоев дропаута (Dropout). Задачей CNN является извлечение локальных временных паттернов (например, коротких трендов и пиков). После всех слоёв применяется адаптивный усредняющий пулинг (AdaptiveAvgPool1d), чтобы сжать выходное представление в вектор фиксированного размера.
- MLP-путь, образованный MLP сетью. Назначением MLP является моделирование более глобальных корреляций между точками временного ряда.

Для входа condition используется отдельная LSTM сеть. Выходы LSTM, CNN, MLP и condition LSTM объединяются и получившийся длинный вектор подается на fusion MLP сеть. Fusion MLP позволяет объединить различные признаки, извлечённые параллельными путями, в одно компактное представление с помощью небольшой MLP сети.

Декодер также содержит три параллельных пути: LSTM-путь, CNN-путь и MLP-путь. Аналогично энкодеру, декодер имеет отдельную condition LSTM, которая обрабатывает вход condition и добавляет его к латентному вектору z для получения общего вектора z_conditional. Вход LSTM формируется как сумма z_conditional и синусоидального позиционного кодирования. LSTM сама по себе учитывает порядок через рекуррентность, но дополнительное явное позиционное кодирование помогает модели различать, какой сейчас шаг (первый, десятый или последний). Это стандартный приём из архитектуры Transformer, адаптированный для улучшения временной осведомлённости в рекуррентных декодерах. Синусоидальное позиционное кодирование не требует дополнительных параметров и обеспечивает гладкое изменение соседних позиций, что естественно для временных рядов. Все три пути декодера конкатенируются и проходят через fusion MLP, а затем через выходной MLP слой для получения правильной реконструкции. Структурная схема CVAE показана на рис. 1.

В функции потерь CVAE к стандартным потерям реконструкции по среднеквадратической ошибке (Mean Squared Error – MSE) и KL-дивергенции (Kullback–Leibler divergence) добавляются дополнительные потери, вычисляемые как MSE между разностями последовательных шагов реконструкции и оригинала. Дополнительный член поощряет плавность реконструкции во времени, что помогает подавлять высокочастотные артефакты и улучшает нормальное поведение. Вклад дополнительных потерь регулируется с помощью весового коэффициента (по умолчанию 0,08).

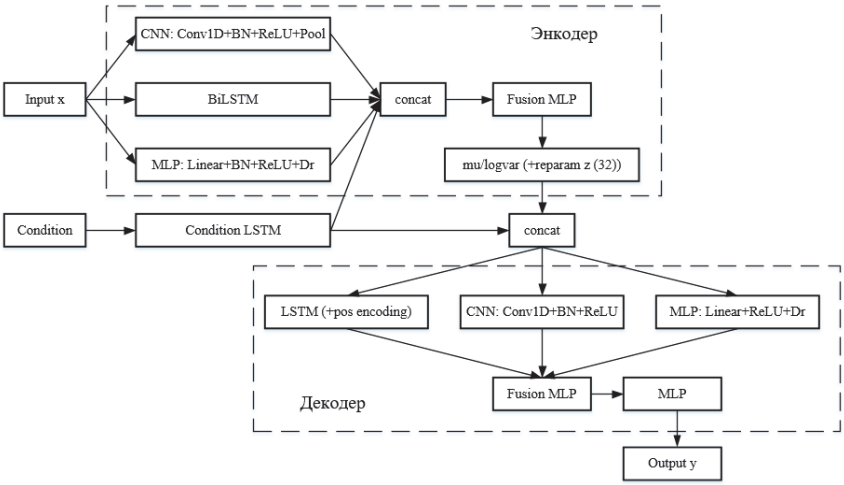


Рис. 1. Структурная схема CVAE

Потери KL-дивергенции умножаются на коэффициент β, который линейно возрастает от 0.01 до 1.0 в процессе обучения (annealing). На ранних этапах ($\beta \approx 0$) модель работает как обычный VAE, фокусируясь исключительно на качестве реконструкции данных. В процессе обучения постепенно вводится регуляризация (β растет), что предотвращает «коллапс апостериорного распределения» (posterior collapse) и улучшает обобщение.

При обучении CVAE из временного ряда выбираются только окна, не содержащие ни одной аномальной точки. Следовательно, модель обучается только на «нормальном» поведении, а возникающие аномалии будут давать высокую ошибку реконструкции. Кроме того, при обучении применяются обрезка (clipping) градиентов для предотвращения взрывов градиентов и уменьшение коэффициента обучения (learning rate) в два раза при отсутствии улучшения средней потери за 12 эпох.

В качестве базовой архитектуры ГНС, рассматриваемой в рамках второго направления, для анализа в присутствии коллективных аномалий была принята архитектура классического трансформера (vanilla transformer). В последнее время транформеры стали все чаще применяться для анализа аномалий во временных рядах, в том числе и для данных об энергопотреблении [6, 7]. Далее будет описан комплекс технических решений, примененный авторами к архитектуре классического трансформера.

Архитектура энкодера и декодера классического трансформера была преобразована в более сложную нейросетевую архитектуру. На входе энкодера трансформера расположены три параллельные 1D свертки с ядрами 3 и коэффициентами расширения (dilation) 1, 2, 4. Разные dilation позволяют захватывать зависимости на коротких (dilation = 1), средних (dilation = 2) и длинных (dilation = 4) интервалах времени, что позволяет выполнять многомасштабный анализ временных рядов. Выходы параллельных сверток конкатенируются, и информация из трех ветвей смешивается с помощью свертки 1x1. Затем с помощью блока Squeeze-Excitation (SE), включающего слой AdaptiveAvgPool1d и два MLP слоя с функциями активации ReLU и Sigmoid, производится адаптивная калибровка каналов, с помощью которой модель учится выделять информативные каналы и подавлять бесполезные. Наличие сверточных слоев позволяет назвать такую архитектуру трансформера гибридным сверточным трансформером (Hybrid Convolutional Transformer – HCT).

Выход SE блока пропускается через слои нормализации (LayerNorm) и дропаута, складывается с результатом позиционного кодирования и подается на вход стандартного слоя трансформерного энкодера (TransformerEncoderLayer). Отсутствие каузальной маски у слоя трансформерного энкодера позволяет энкодеру видеть всю последовательность целиком, что дает возможность захватывать глобальные зависимости по обе стороны последовательности.

Декодер HCT включает стандартный слой трансформерного декодера (TransformerDecoderLayer), на вход которого поступают потоки со входа и выхода слоя трансформерного энкодера. Наличие каузальной маски у слоя трансформерного декодера запрещает декодеру «подглядывать» в будущие шаги при прогнозировании текущего. Модель учится выполнять авторегрессионное прогнозирование с использованием памяти энкодера. Структурная схема HCT показана на рис. 2.

При обучении HCT вместо обычных MSE потерь используется функция асимметричных MSE потерь (asymmetric mse loss). Эта функция штрафует за ошибки, превышающие некоторый порог (threshold) в α раз. Также при обучении HCT применяются обрезка градиентов, планировщик (scheduler)

с коэффициентом γ, обеспечивающий плавное снижение коэффициента обучения и техника прерывания обучения (early stopping), если потери на валидации не будут уменьшаться в течение 20 эпох подряд.

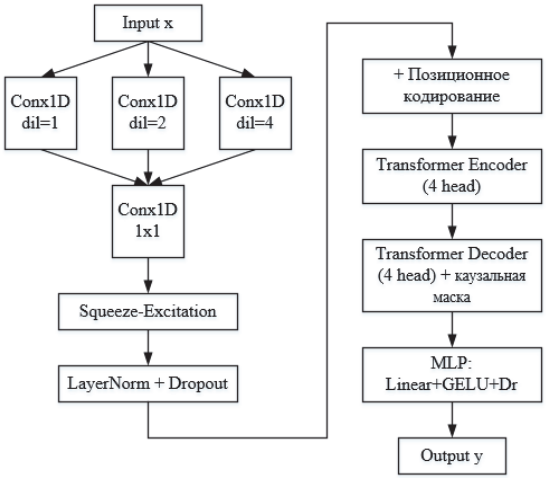


Рис. 2. Структурная схема НСТ

Анализ литературных источников [3, 5–7] показал, что описанные архитектуры CVAE и НСТ никогда ранее не использовались для анализа аномалий в данных об энергопотреблении.

Результаты численных экспериментов

Описанные в предыдущей секции модели CVAE и НСТ были использованы для анализа аномалий в данных датасета LEAD1.0 [4]. Этот датасет на данный момент является крупнейшим из размеченных наборов данных для анализа энергетических аномалий в открытом доступе. В LEAD1.0 собраны данные почасовых показаний с 1413 приборов учета электроэнергии, охватывающие 16 различных типов зданий за один год.

Данные датасета LEAD1.0 разбивались по отдельным зданиям. В экспериментах использовались данные 8 зданий с номерами 247, 439, 1225, 1238, 1258, 1284, 1309, 1319. Данные об энергопотреблении этих зданий включают как одиночные, так и коллективные аномалии, возможные причины возникновения которых были отмечены в начале статьи. На рис. 3 показан

график данных об энергопотреблении для здания 1319 на тестовой выборке с отмеченными аномалиями.

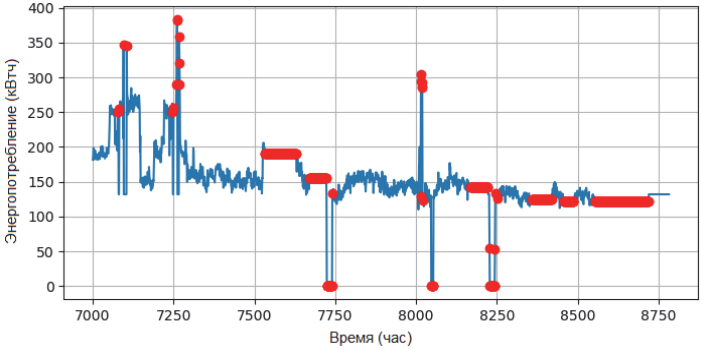


Рис. 3. График данных об энергопотреблении для здания 1319 с отмеченными аномалиями

Предобработка датасета включала заполнение пропущенных значений и стандартизацию данных. Затем все данные разделялись на обучающее и тестовое множества в пропорции 75 и 25 % соответственно. На обучающем множестве производилось обучение моделей (на данных без аномалий) с применением обучения без учителя, а на тестовом проверялось качество работы моделей с использованием размеченных данных.

Для оценки качества работы алгоритмов использовался следующий набор метрик: Precision, Recall, F1 (F-мера), AUC. Эти метрики чаще всего применяются при оценке результатов работы моделей, обученных методом обучения без учителя, при анализе аномалий.

Для оценки возможностей моделей по детекции одиночных и коллективных аномалий были выполнены две серии экспериментов. В первой серии оценивалась способность моделей по детекции только одиночных аномалий. Для этого из набора данных удалялись коллективные аномалии, так, как это было сделано в работе [3]. Во второй серии экспериментов оценивалась способность моделей по детекции аномалий при наличии коллективных аномалий.

Для всех используемых детекторов производилась настройка параметра contamination путем грубого прямого перебора вариантов с целью достижения максимума метрики F1 по данным тестовой выборки.

В табл. 1 и 2 показаны результаты численных экспериментов по детекции одиночных аномалий в данных об энергопотреблении для зданий с номерами 1319 и 1258 из датасета LEAD1.0 с использованием модели CVAE. В эксперименте применялась модель CVAE с одним слоем LSTM, двумя слоями 1D CNN с фильтрами размером 16 и 32 соответственно и двумя слоями MLP. Размерность латентного пространства CVAE принималась равной 32. Для сравнения там же приведены результаты для алгоритмов HBOS, LODA и VAE, полученные в работе [3]. Значения метрик определялись в результате усреднения по результатам десяти опытов. Статистические тесты для оценки достоверности детекции аномалий не проводились.

Таблица 1

Результаты анализа одиночных аномалий для здания 1319

Модель	Precision	Recall	F1	AUC
CVAE	0,769	0,488	0,597	0,852
HBOS	0,741	0,488	0,588	0,742
LODA	0,72	0,439	0,546	0,718
VAE	0,370	0,488	0,421	0,734

Таблица 2

Результаты анализа одиночных аномалий для здания 1258

Модель	Precision	Recall	F1	AUC
CVAE	0,885	0,657	0,754	0,79
HBOS	1,0	0,6	0,75	0,8
LODA	1,0	0,6	0,75	0,8
VAE	0,75	0,6	0,667	0,798

Данные из таблиц показывают, что точность анализа одиночных аномалий по метрике F1 для модели CVAE превосходит не только точность классического VAE, но и точность моделей HBOS и LODA, которые были лучшими в анализе одиночных аномалий в данных из датасета LEAD1.0 среди всех, рассмотренных авторами моделей МО и ИНС [3]. Следовательно, те доработки, которые произвели авторы в модели классического VAE, привели к появлению модели CVAE, которая может стать одним из лидеров среди моделей МО, применяемых для анализа одиночных аномалий в данных об энергопотреблении.

В табл. 3 показан результат численных экспериментов по детекции аномалий (при наличии коллективных аномалий) в данных об энергопотреблении для здания с номером 1319 с использованием модели HCT. В эксперименте применялась модель HCT, у которой энкодер и декодер включали по

4 слоя и 4 головы внимания. Для сравнения там же приведены результаты для алгоритмов LOF и ROD и классического трансформера (vanilla transformer). Значения метрик определялись в результате усреднения по результатам десяти опытов.

Таблица 3

Результаты анализа аномалий для здания 1319

Модель	Precision	Recall	F1	AUC
HCT	0,37	0,9	0,523	0,622
LOF	0,319	0,981	0,482	0,548
ROD	0,42	0,894	0,572	0,69
vanilla transformer	0,134	0,117	0,125	0,398

Из табл. 3 видно, что точность анализа аномалий по метрике F1 для модели HCT превосходит точность LOF, немного уступает по точности ROD и разительно отличается, в лучшую сторону, от точности, полученной моделью классического трансформера. Это говорит о том, что те изменения, которые произвели авторы в модели классического трансформера, позволили получить модель, работающую, при наличии коллективных аномалий в данных из датасета LEAD1.0, на уровне лучших моделей МО.

Заключение

Таким образом, в работе описаны исследования по применению ГНС для анализа аномалий в данных об энергопотреблении. Авторы попытались найти такие технические решения (архитектурные, в обучении моделей и другие), которые бы позволили ГНС сравняться по точности с другими методами МО или даже превзойти их, как при анализе одиночных аномалий, так и при наличии коллективных аномалий.

В качестве базовой архитектуры ГНС для анализа одиночных аномалий была принята архитектура VAE. Доработки, которые произвели авторы в модели классического VAE, привели к появлению модели CVAE, которая превзошла по точности не только точность классического VAE, но и точность моделей HBOS и LODA, которые были лучшими в анализе одиночных аномалий в данных из датасета LEAD1.0 среди всех, рассмотренных авторами моделей МО. В качестве базовой архитектуры ГНС для анализа в присутствии коллективных аномалий была принята архитектура классического трансформера. Изменения, которые произвели авторы в модели классического трансформера, привели к появлению модели HCT, которая значительно превзошла точность классического трансформера и сравнялась по точности с лучшими, из рассмотренных авторами, моделями МО.

Следовательно, полученная модель CVAE может эффективно применяться для анализа одиночных аномалий в данных об энергопотреблении, а модель НСТ – при наличии в данных коллективных аномалий. Результаты исследований могут использоваться в системах интеллектуального анализа данных об энергопотреблении.

Список литературы

1. Lindemann B., Maschler B., Sahlab N., Weyrich M. A survey on anomaly detection for technical systems using LSTM networks // Computers in Industry. 2021. V. 131. P. 1–11.

2. Himeur Y., Ghanem K., Alsalemi A., Bensaali F., Amira A. Artificial intelligence based anomaly detection of energy consumption in buildings: A review, current trends and new perspectives // Applied Energy. 2021. V. 287. P. 1–26.

3. Марьясин О.Ю., Тихомиров Л.И. Выявление одиночных аномалий в данных об энергопотреблении с использованием методов машинного обучения без учителя // Управление большими системами. 2025. № 113. С. 232–272.

4. Gulati M., Arjunan P. LEAD1.0: A large-scale annotated dataset for energy anomaly detection in commercial buildings // arXiv:2203.17256v1. 2022. P. 1–5.

5. Maryasin O.Y., Tihomirov L. Using Generative Neural Networks to Detect Point Anomalies in Energy Consumption Data // International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency. 2024. P. 1–6.

6. Mu T., Yu Y., Feng G., Luo H., Yang H. Detecting anomalous electricity consumption with transformer and synthesized anomalies // PeerJ Computer Science. 2023. P. 1–17.

7. Mao Z., Zhou B., Huang J., Liu D., Yang Q. Research on Anomaly Detection Model for Power Consumption Data Based on Time-Series Reconstruction // Energies. 2024. V. 17. P. 1–12.

И.И. ФИЛИППОВ
Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого,
Великий Новгород
Zerkon190@yandex.ru

ДОВЕРЕННОЕ OCR-РАСПОЗНАВАНИЕ НА ОСНОВЕ КАЛИБРОВКИ УВЕРЕННОСТИ И ВЫБОРОЧНОГО ПРИНЯТИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ

Предложен метод TrustOCR для повышения надёжности оптического распознавания текста (OCR) на шумных сканированных документах. Метод строится как слой доверия поверх базовой OCR-модели и использует калибровку уверенности для выбора между автоматическим принятием результата и ручной проверкой. Эксперименты проводились на FUNSD, наборе сканированных форм, и SROIE, наборе чеков и квитанций. На FUNSD посимвольная ошибка распознавания (CER) среди автоматически принятых фрагментов снижается с 0,146 до 0,080 при покрытии 86 %. Результаты показывают, что калиброванная уверенность может использоваться для управления риском ошибки в режиме частичной автоматизации OCR.

Ключевые слова: *оптическое распознавание текста, OCR, калибровка уверенности, доверенное машинное обучение, выборочное принятие предсказаний, отказ от предсказания, обработка документов, TrOCR, риск ошибки.*

Введение

Оптическое распознавание текста (OCR) является одной из базовых задач интеллектуальной обработки документов. Современные OCR-модели, включая нейросетевые распознаватели на основе архитектур Transformer, показывают высокое качество на открытых наборах данных [1]. Однако в реальных сценариях сохраняются ошибки, связанные с шумами сканирования, сложной структурой страниц, низким качеством изображений и неточным выделением текстовых областей. Поэтому для прикладных систем важно оценивать не только среднюю точность распознавания, но и надёжность отдельных предсказаний.

Классические метрики OCR, такие как посимвольная ошибка распознавания (CER), пословная ошибка распознавания (WER) и точное совпадение строки, не отвечают на эксплуатационный вопрос: какие результаты можно

принять автоматически, а какие требуют ручной проверки. Такая постановка близка к задаче отказа от предсказания и выборочного принятия результатов, рассматриваемой в работах по отказу от предсказания (reject option) и выборочной классификации (selective classification) [5, 6]. Одним из признаков надёжности является оценка уверенности модели, однако она не всегда является калиброванной вероятностью корректного распознавания [4, 7].

В данной работе предлагается метод TrustOCR – слой доверия поверх базовой OCR-модели. Он объединяет OCR-предсказание, калибровку уверенности и правило ACCEPT/REVIEW: надёжные результаты принимаются автоматически, а сомнительные направляются на ручную проверку. Такая постановка позволяет управлять компромиссом между покрытием автоматической обработки и ошибкой среди принятых результатов.

Экспериментальная проверка проводится на двух открытых наборах данных: FUNSD, содержащем шумные сканированные формы [2], и SROIE, содержащем изображения чеков и квитанций [3]. Основной вклад работы состоит в постановке доверенного OCR как задачи выборочного принятия предсказаний, реализации слоя TrustOCR и демонстрации того, что улучшение метрик калибровки не всегда совпадает с улучшением практического режима ACCEPT/REVIEW.

Связь с существующими OCR-подходами

Существующие OCR-системы, такие как TrOCR [1], PaddleOCR [11] и подходы на основе CRAFT, используемые в ряде процессов OCR [10], в первую очередь решают задачу получения текстового предсказания по изображению. Современные визуально-языковые модели также могут применяться для извлечения текста из документов, однако их использование не устраняет вопрос эксплуатационной надёжности: даже сильная модель может выдавать ошибочные результаты с высокой уверенностью.

В отличие от работ, сравнивающих архитектуры OCR-моделей, данное исследование рассматривает дополнительный слой принятия решений, который может быть применён поверх базового распознавателя. Поэтому экспериментальная часть сфокусирована не на соревновании TrOCR с другими OCR-системами, а на оценке калибровки уверенности и режима ACCEPT/REVIEW. Сравнение TrustOCR с разными базовыми распознавателями рассматривается как направление дальнейшей работы.

Постановка задачи и метод TrustOCR

Рассматривается задача обработки фрагментов сканированных документов, для которых известны эталонные текстовые строки. Базовая OCR-модель по изображению фрагмента формирует предсказанную строку и оценку уверенности. В классической постановке качество такой модели оценивается только по ошибке распознавания, однако для практического применения важно также определить, можно ли автоматически использовать полученный результат.

Метод TrustOCR строится как слой доверия поверх базовой OCR-модели. Он не заменяет распознаватель, а добавляет этап принятия решения о надёжности результата. Для каждого фрагмента система выбирает один из двух режимов: ACCEPT – результат принимается автоматически, или REVIEW – фрагмент направляется на ручную проверку.

Входными данными TrustOCR являются изображение текстового фрагмента, предсказанная OCR-моделью строка и исходная оценка уверенности. Выходными данными являются распознанная строка и решение ACCEPT/REVIEW. Новыми компонентами по сравнению с обычным процессом OCR являются калибровка уверенности и блок принятия решения, который определяет, можно ли использовать результат без участия оператора.

В проведённых экспериментах оценка уверенности фрагмента рассматривалась как скалярный показатель доверия к предсказанной строке. Для метрик калибровки использовалась бинарная целевая переменная корректности распознавания: предсказание считалось корректным при совпадении нормализованной строки с эталоном. Посимвольная ошибка распознавания (CER) и пословная ошибка распознавания (WER) использовались как дополнительные текстовые метрики качества. Для расчёта ожидаемой ошибки калибровки (ECE) использовалось разбиение диапазона уверенности на интервалы, внутри которых сравнивались средняя уверенность и наблюдаемая доля корректных предсказаний [4].

Алгоритм 1. Работа слоя TrustOCR

Вход: текстовый фрагмент документа, базовая OCR-модель, метод калибровки, порог доверия.

Выход: распознанная строка и решение ACCEPT/REVIEW.

1. Получить OCR-предсказание для текстового фрагмента.
2. Вычислить исходную оценку уверенности предсказания.
3. Применить выбранный метод калибровки уверенности.
4. Сравнить калиброванную уверенность с заданным порогом.

5. Если уверенность не ниже порога, присвоить решению значение ACCEPT.

6. Если уверенность ниже порога, присвоить решению значение REVIEW.

7. Рассчитать покрытие автоматической обработки и ошибку среди принятых фрагментов.

Покрытие показывает, какая доля фрагментов была обработана автоматически. Ошибка среди принятых результатов показывает качество OCR только на тех фрагментах, которые система не отправила на ручную проверку. Таким образом, оценивается не только среднее качество распознавания, но и управляемый компромисс между автоматизацией и риском ошибки.

В работе отдельно различаются качество калибровки и полезность оценки уверенности для принятия решений. Хорошая калибровка означает, что численная уверенность лучше соответствует фактической вероятности корректного распознавания. Однако это не гарантирует лучший режим ACCEPT/REVIEW, поскольку монотонная перекалибровка скалярной оценки меняет численную шкалу уверенности, но не обязательно меняет ранжирование фрагментов по надёжности. Поэтому практическая полезность метода определяется не только значениями ожидаемой ошибки калибровки (ECE), оценки Брайера (Brier score) и отрицательного логарифмического правдоподобия (NLL), но и поведением системы в режиме ACCEPT/REVIEW [4, 6, 8].



Рис. 1. Схема TrustOCR как слоя доверия поверх базовой OCR-модели. Новыми компонентами являются калибровка уверенности и блок ACCEPT/REVIEW, определяющий автоматическое принятие результата или передачу на ручную проверку

Экспериментальная схема

Эксперименты проводились на двух открытых наборах данных: FUNSD и SROIE. FUNSD использовался как сценарий шумных сканированных форм [2], SROIE – как внешний сценарий на чеках и квитанциях [3]. Наборы применялись не для прямого сравнения сложности, а для проверки TrustOCR на разных типах документов.

В качестве базовой OCR-модели использовалась предварительно обученная TrOCR [1]. TrustOCR рассматривался как внешний слой над распознавателем: он не изменяет OCR-модель, а оценивает надёжность её результата. Распознавание выполнялось на уровне фрагментов: сущностей для FUNSD и строк для SROIE, что соответствует структуре исходной разметки.

Для каждого фрагмента сохранялись эталонный текст, предсказание, оценка уверенности и время обработки. После нормализации текста качество OCR оценивалось по CER, WER и точному совпадению строки, качество калибровки – по ожидаемой ошибке калибровки (ECE), оценке Брайера (Brier score) и отрицательному логарифмическому правдоподобию (NLL). В режиме ACCEPT/REVIEW дополнительно измерялись покрытие автоматической обработки и ошибка среди принятых фрагментов.

Сравнивались базовый режим без отказа, исходная уверенность, температурная калибровка [4], изотоническая регрессия [9] и масштабирование Платта (Platt scaling) [8]. Рабочие пороги ACCEPT/REVIEW рассматривались как демонстрационные рабочие точки, выбранные для анализа компромисса между покрытием и ошибкой. Поэтому полученные значения следует интерпретировать как экспериментальную оценку поведения метода, а не как гарантированную оценку качества на новых документах. Для промышленного применения пороги должны подбираться на независимой валидационной выборке с последующей проверкой на тестовых данных.

Характеристика использованных данных приведена в табл. 1.

Таблица 1

Использованные наборы данных и единицы распознавания

Набор данных	Тип документов	Единица распознавания	Число фрагментов
FUNSD	Сканированные формы	Сущность	2000
SROIE	Чеки и квитанции	Строка	2000

Результаты экспериментов

На первом этапе было оценено базовое качество OCR-модели без использования механизма отказа от ненадёжных предсказаний. Результаты показывают, что качество распознавания существенно зависит от выбранной единицы обработки документа. При прямом распознавании целой страницы модель TrOCR формировала слишком короткие ответы по сравнению с эталонным текстом, что приводило к почти полной потере практической применимости результата. Поэтому в дальнейших экспериментах использовался подход на уровне фрагментов: для FUNSD – распознавание сущностей документа, для SROIE – распознавание строк.

Базовые результаты приведены в табл. 2. На наборе FUNSD после нормализации текста значение CER составило 0,1457, а доля точных совпадений – 0,6155. На наборе SROIE значение CER составило 0,3341 при доле точных совпадений 0,6325. Эти результаты показывают, что базовая OCR-модель даёт осмысленное качество, однако её ошибки остаются достаточно существенными для сценариев полностью автоматической обработки документов.

Таблица 2

Базовое качество OCR-модели

Набор данных	CER	WER	Точное совпадение	Среднее время, мс
FUNSD	0,1457	0,3077	0,6155	119,8
SROIE	0,3341	0,2862	0,6325	161,0

Следует отметить, что нормализация текста заметно меняет оценку качества на FUNSD: часть строгих ошибок была связана с различиями в регистре, пробелах и форматировании. Поэтому далее основное внимание уделяется нормализованным метрикам, так как они лучше отражают содержательную корректность распознавания.

На втором этапе была исследована согласованность численной уверенности OCR-модели с фактической корректностью распознавания. Для этого сравнивались исходная оценка уверенности, температурная калибровка, изотоническая регрессия и масштабирование Платта. Качество калибровки оценивалось по метрикам ECE, оценке Брайера и NLL.

Результаты приведены в табл. 3. На обоих наборах данных исходная уверенность оказалась существенно завышенной. Для FUNSD значение ECE снизилось с 0,3451 до 0,0868 при использовании изотонической регрессии, а для SROIE – с 0,3320 до 0,0363. Это показывает, что исходная

оценка уверенности OCR-модели не должна напрямую использоваться как вероятность корректного распознавания.

Таблица 3

Сравнение методов калибровки уверенности

Набор данных	Метод	ECE	Оценка Брайера	NLL
FUNSD	Без калибровки	0,3451	0,3144	1,2359
FUNSD	Температурная	0,1509	0,2164	0,6191
FUNSD	Изотоническая	0,0868	0,1731	0,5395
FUNSD	Платт	0,1300	0,1955	0,5740
SROIE	Без калибровки	0,3320	0,3173	1,3084
SROIE	Температурная	0,1203	0,2092	0,6030
SROIE	Изотоническая	0,0363	0,1740	0,5162
SROIE	Платт	0,1016	0,2042	0,5974

Калибровка существенно улучшает вероятностную интерпретацию оценки уверенности: наилучшие значения ECE на обоих наборах данных получены при использовании изотонической регрессии [9]. Однако снижение ECE не гарантирует лучший режим ACCEPT/REVIEW, поскольку для автоматической обработки важно не только соответствие уверенности фактической точности, но и способность оценки уверенности отделять надёжные предсказания от ненадёжных.

На третьем этапе был исследован режим ACCEPT/REVIEW. В этом режиме часть фрагментов документа принимается автоматически, а часть направляется на ручную проверку. При увеличении порога доверия покрытие автоматической обработки уменьшается, но ошибка среди принятых фрагментов также снижается.

Результаты приведены в табл. 4. На наборе FUNSD метод TrustOCR позволяет снизить CER среди автоматически принятых фрагментов с 0,1457 до 0,0804 при сохранении покрытия 0,86. При более строгом пороге CER снижается до 0,0323, однако покрытие уменьшается до 0,486. Это показывает, что для данного набора данных метод обеспечивает управляемый компромисс между качеством и долей автоматической обработки.

На наборе SROIE эффект оказался менее устойчивым. Низкая ошибка среди принятых фрагментов достигалась только при резком сокращении покрытия, поэтому данный режим имеет ограниченную практическую применимость. Этот результат показывает, что TrustOCR не является универ-

сальным способом улучшения OCR: его эффективность зависит от типа документов, единицы распознавания и способности оценки уверенности отделять корректные предсказания от ошибочных.

Таблица 4

Результаты режима ACCEPT/REVIEW

Набор данных	Режим	Покрытие	CER среди принятых	Точное совпад. среди принятых
FUNSD	Без отказа	1,000	0,1457	0,6155
FUNSD	Температурная, $\tau = 0{,}60$	0,860	0,0804	0,6674
FUNSD	Температурная, $\tau = 0{,}75$	0,486	0,0323	0,8148
SROIE	Без отказа	1,000	0,3341	0,6325
SROIE	Строгий порог	0,048	Менее 0,100	–

Примечание. Для SROIE низкая ошибка среди принятых фрагментов достигалась только при покрытии менее 5 %, поэтому данный режим рассматривается как ограниченно применимый на практике.

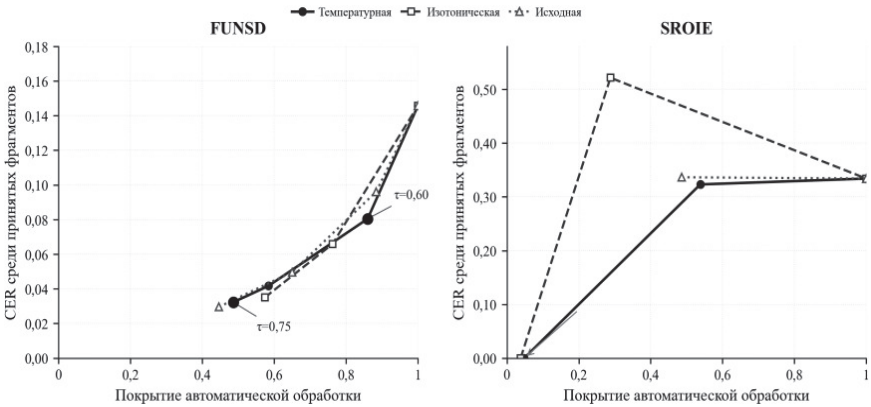


Рис. 2. Зависимость ошибки среди принятых фрагментов от покрытия автоматической обработки

Рис. 2 показывает зависимость ошибки среди принятых фрагментов от покрытия автоматической обработки. На FUNSD увеличение порога доверия снижает ошибку среди принятых результатов при умеренном уменьшении покрытия. На SROIE зависимость менее благоприятна: достижение низкого риска требует почти полного отказа от автоматической обработки. Следовательно, полезность TrustOCR определяется не только качеством калибровки, но и тем, насколько информативна оценка уверенности в конкретном домене документов.

Обсуждение и ограничения

Полученные результаты показывают, что надёжность OCR-системы не сводится к средним значениям CER или WER. Для прикладного использования важно не только качество распознавания в среднем, но и способность системы заранее выделять фрагменты с повышенным риском ошибки. В этом смысле TrustOCR следует рассматривать не как способ непосредственного улучшения базовой OCR-модели, а как слой управления эксплуатационным риском.

Наиболее устойчивый эффект получен на наборе FUNSD: режим ACCEPT/REVIEW позволил снизить ошибку среди принятых фрагментов при сохранении значительной доли автоматической обработки. Это означает, что калиброванная оценка уверенности может быть полезна для сценариев частичной автоматизации, где надёжные случаи обрабатываются автоматически, а неоднозначные передаются оператору.

Результаты на SROIE показывают границы применимости предложенного подхода. Если оценка уверенности плохо отделяет корректные предсказания от ошибочных, то даже качественная калибровка не обеспечивает полезного режима автоматической обработки. В таком случае система становится слишком консервативной: для достижения низкого риска ей приходится отправлять на проверку почти все фрагменты. Этот результат согласуется с тем, что калибровка вероятности и пригодность оценки для выборочного принятия решений являются разными свойствами модели [4, 6, 12].

Проведённое исследование имеет несколько ограничений. Во-первых, в качестве базовой OCR-модели использовалась только TrOCR, поэтому выводы требуют проверки на других моделях распознавания, включая PaddleOCR, EasyOCR/CRAFT-подходы и современные визуально-языковые модели [10, 11]. Во-вторых, эксперименты проводились на открытых наборах FUNSD и SROIE, что не позволяет напрямую обобщать результаты на все типы промышленных и архивных документов [2, 3]. Кроме того, рабочие пороги ACCEPT/REVIEW рассматривались как экспериментальные рабочие точки и для промышленного применения должны выбираться на независимой валидационной выборке.

В работе не оценивался полный производственный цикл с участием оператора. Поэтому измерялись метрики на уровне отдельных фрагментов документа, но не фактическое сокращение времени ручной обработки. Этот аспект требует отдельной проверки в прикладных пилотах.

Заключение

В работе рассмотрена задача повышения надёжности OCR-систем при обработке шумных сканированных документов. Предложен метод TrustOCR, который строится как слой доверия поверх базовой OCR-модели и использует калибровку уверенности для выбора между автоматическим принятием результата и передачей фрагмента на ручную проверку.

Эксперименты на наборах FUNSD и SROIE показали, что исходные оценки уверенности OCR-модели являются переуверенными и не должны напрямую интерпретироваться как вероятность корректного распознавания. Калибровка улучшает вероятностную интерпретацию оценки уверенности, однако её практическая полезность зависит от способности этой оценки отделять надёжные предсказания от ненадёжных.

На FUNSD режим ACCEPT/REVIEW позволил снизить CER среди автоматически принятых фрагментов с 0,1457 до 0,0804 при сохранении покрытия 0,86. На SROIE достижение низкой ошибки потребовало значительного сокращения покрытия. Таким образом, TrustOCR следует рассматривать не как универсальный способ улучшения OCR, а как инструмент управления компромиссом между автоматизацией и риском ошибки. Дальнейшая работа может быть направлена на проверку метода с другими OCR-моделями, расширение набора доменов и оценку влияния режима ACCEPT/REVIEW на фактическое сокращение ручной обработки документов.

Список литературы

1. Li M., Lv T., Chen J., Cui L., Lu Y., Florencio D., Zhang C., Li Z., Wei F. TrOCR: Transformer-based Optical Character Recognition with Pre-trained Models // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2023.

2. Jaume G., Ekenel H.K., Thiran J.-P. FUNSD: A Dataset for Form Understanding in Noisy Scanned Documents // Proceedings of the International Conference on Document Analysis and Recognition Workshops. 2019.

3. Huang Z., Chen K., He J., Bai X., Karatzas D., Lu S., Jawahar C.V. ICDAR2019 Competition on Scanned Receipt OCR and Information Extraction // Proceedings of the International Conference on Document Analysis and Recognition. 2019.

4. Guo C., Pleiss G., Sun Y., Weinberger K.Q. On Calibration of Modern Neural Networks // Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning. 2017. Vol. 70. P. 1321–1330.

5. Chow C.K. On Optimum Recognition Error and Reject Tradeoff // IEEE Transactions on Information Theory. 1970. Vol. 16. No. 1. P. 41–46.

6. Geifman Y., El-Yaniv R. Selective Classification for Deep Neural Networks // Advances in Neural Information Processing Systems. 2017.

7. Niculescu-Mizil A., Caruana R. Predicting Good Probabilities with Supervised Learning // Proceedings of the 22nd International Conference on Machine Learning. 2005. P. 625–632.

8. Platt J. Probabilistic Outputs for Support Vector Machines and Comparisons to Regularized Likelihood Methods // Advances in Large Margin Classifiers. Cambridge: MIT Press. 1999. P. 61–74.

9. Zadrozny B., Elkan C. Transforming Classifier Scores into Accurate Multiclass Probability Estimates // Proceedings of the ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. 2002. P. 694–699.

10. Baek Y., Lee B., Han D., Yun S., Lee H. Character Region Awareness for Text Detection // Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2019. P. 9365–9374.

11. Cui C., Sun T., Lin M., Gao T., Zhang Y., Liu J., Wang X., Zhang Z., Zhou C., Liu H., Zhang Y. PaddleOCR 3.0 Technical Report // arXiv preprint arXiv:2507.05595. 2025.

12. Geifman Y., Uziel G., El-Yaniv R. Bias-Reduced Uncertainty Estimation for Deep Neural Classifiers // International Conference on Learning Representations. 2019.

А.И. КАНЕВ
МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва
aikanev@bmstu.ru

КЛАСТЕРИЗАЦИЯ ФРАГМЕНТОВ НА СТОРОНЕ КЛИЕНТА В БРАУЗЕРЕ ДЛЯ ЛОКАЛЬНОЙ МУЛЬТИМОДАЛЬНОЙ RAG-СИСТЕМЫ

Большие объемы информации требуют использования методов искусственного интеллекта для ее обработки, в первую очередь больших языковых моделей (LLM). Современные дистиллированные и квантованные генеративные модели можно запускать локально на устройстве пользователя, в том числе в браузере. Это устраняет необходимость передачи конфиденциальных данных по сети. Для моделей с небольшим количеством параметров и размером контекста используется метод Retrieval-Augmented Generation (RAG), который уменьшает объем данных, подаваемых в модель, и ускоряет время генерации ответа. Запуск моделей в браузере избавляет от необходимости устанавливать дополнительное программное обеспечение на компьютер пользователя. Однако развитие таких RAG-систем сдерживает отсутствие популярных решений и векторных хранилищ для браузе-

ров. При больших объемах документов и их фрагментов время поиска увеличится, потребуются специализированные структуры хранения. Наличие изображений в документах требует использования мультимодальных моделей для их обработки. Однако применять его непосредственно к фрагментам текста нецелесообразно, так как кодировщик текста рассчитан на значительно меньшую длину текста и требует дополнительной обработки. Предложенная в данной работе кластеризация фрагментов в RAG-браузерном приложении для случаев текстов и вопросов по разным предметным областям существенно повысила точность поиска, сократила время поиска на 20 %, а также существенно сократила количество вычислений при мультимодальном поиске.

Ключевые слова: *Retrieval-Augmented Generation (RAG), кластеризация, браузерные LLM, SigLIP.*

Введение

Модели локальных нейронных сетей, работающие на стороне клиента, играют важную роль и набирают популярность с ростом производительности пользовательских устройств [1, 2]. Они позволяют обрабатывать конфиденциальные данные и решают проблему высокой задержки в сети. Конфиденциальные данные встречаются в судебной экспертизе [3], медицине [4] и других областях.

Запуск локальных моделей в браузере требует дополнительного программного обеспечения, необходимого на компьютере пользователя. Развитие WebLLM сыграло значительную роль в развитии генерации текста в браузере, позволив запускать генеративные языковые модели с более чем 1 миллиардом параметров [1]. Для внедрения моделей используются технологии ONNX.js и Transformer.js.

Локальные модели характеризуются ограниченным размером контекста; для решения этой проблемы используется метод RAG [5]. В этом методе на вход модели подаются фрагменты документов пользователя, соответствующие его запросу.

Второй элемент RAG-систем после генеративной модели – ретривер. Для каждого фрагмента пользовательских документов он вычисляет вектор в плотном или разреженном пространстве. Для разреженных представлений используются TF-IDF или BM25 [6], а для плотных —– модели нейронных сетей. Такие представления можно использовать для поиска, а также

для классификации или кластеризации фрагментов [3]. Полученные результаты необходимо фильтровать, используя фиксированные или динамические пороги фильтрации.

Третий важный элемент RAG-систем – векторное хранилище. Для этого обычно используются серверные решения, такие как Qdrant, часто использующие метод HNSW [2]. Популярных решений для браузеров нет, хотя некоторые авторы предлагают собственные RAG-приложения на основе браузера, например MeMemo [2]. В этой статье автор предлагает векторную кластеризацию в браузере для локального векторного хранилища RAG. Это позволяет сократить время поиска текстовых запросов. Что касается методов кластеризации, в [7] отмечается, что DBSCAN сталкивается с трудностями при работе с текстами новостей, тогда как K-means хорошо фиксирует структуру данных.

Большой объем мультимедийных данных в документах пользователя требует использования мультимодальных моделей для обработки. Классическим примером мультимодальных моделей является CLIP, представленный в 2021 году [8]. Вариантом этой модели с сигмоидной функцией потерь является модель SigLIP [9], которая демонстрирует более высокую точность zero-shot и лучшую производительность. Однако следует отметить, что длина текста мультимодальной модели значительно короче, поскольку в нее подают краткое описание или подпись к изображению, а не абзац текста.

Также такие модели хуже поддерживают другие языки, кроме английского. Поэтому использование таких моделей в RAG-системах невозможно; необходимы преобразования фрагментов. Использование кластеризации фрагментов уменьшает количество вычислений, необходимых для мультимодального внедрения, ограничивая рассмотрение медоидами кластеров.

Поэтому важно изучить потенциал внедрения кластеризации для решения этих проблем при мультимодальном поиске, выполняемом локально в браузере.

Методы

В основе предложенного автором метода лежит кластеризация векторов фрагментов документов, что позволяет решить три ключевые задачи: расчет динамического порога, сокращение объема вычислений при поиске и ограничение вычислений для мультимодальной модели.

При добавлении нового документа рассчитывается новое количество кластеров и, при необходимости, выполняется кластеризация фрагментов. Для каждого кластера вычисляется его геометрический центр μ. Фрагмент

d включается в кластер $c_i(t)$ на итерации *t*, если его эмбеддинг ближе к центру этого кластера согласно косинусному сходству:

$$C_j(t) = \{d_i : \mu_j(t) \cdot e_i \geq \mu_k(t) \cdot e_i, \forall k \neq j\}. \quad (1)$$

В процессе поиска используется нормализованный эмбеддинг q_{text}, полученный с помощью текстовой модели. При поиске применяется динамический порог фильтрации, рассчитываемый как среднее значение расстояний внутри кластеров и между ними. На первом этапе отбираются кластеры на основе косинусного сходства с вектором запроса, а на втором – анализируются фрагменты из этих кластеров:

$$D(q_{text}) = \{d_i \in U\, C_j : q_{text} \cdot \mu_j \geq \tau_{dyn}\}, \quad (2)$$

$$R_{text}(q_{text}) = \{d_i \in D(q_{text}) : q_{text} \cdot e_i \geq q_{text} \cdot e_{i+1} \geq \tau_{dyn}\}_{i=1,\,k}. \quad (3)$$

Окончательные результаты отсортированы, и отображается не более k_{text} из них. Помимо текста, система хранит изображения; для их обработки используется мультимодальная модель, применяющая два отдельных энкодера для отображения коротких текстов и изображений в общее пространство. Если поисковый запрос короткий и составлен на английском языке, в результаты поиска также включаются соответствующие изображения. К этим изображениям применяется фиксированный порог.

Пользователь может использовать изображения в качестве поискового запроса. Для преодоления ограничений мультимодальных моделей предлагается использовать генеративную текстовую модель, преобразующую фрагменты исходного текста в подходящий формат. Для получения текстовых результатов анализируются только медоиды кластеров. Фрагменты d_j медоидов объединяются генеративной моделью в краткий текст на английском языке, для которого затем формируется вектор h_j с использованием текстовой части модели CLIP:

$$s_j = LLM_{eng}(d_j), \quad (4)$$

$$h_j = f_{clip}(s_j),\ h_j \in R^{clip}, \quad (5)$$

$$R_{text}(q_{pic}) = \{d_j : q_{pic} \cdot h_j \geq q_{pic} \cdot h_{j+1} \geq \tau_{clip}\}_{i=1,\,k}. \quad (6)$$

Полученные в результате текстового поиска данные объединяются в единую строку и вместе с системным промптом и запросом пользователя подаются на вход генеративной модели для ответа на вопрос. Для ответа на

вопрос используется та же генеративная модель, что и для суммаризации методом медоидов.

Результаты

Динамический порог существенно повысил точность поиска вопросов по документам из другой предметной области. Повышение точности позволило в несколько раз сократить объем входных данных генеративной модели, тем самым сократив время генерации ответа. Использование кластеризации и динамического порога сократило время поиска на 20% вопросов по другой предметной области.

Для проведения эксперимента с использованием предложенного метода мультимодального поиска было разработано веб-приложение со следующей архитектурой (см. рис. 1). Приложение состоит только из интерфейса на JavaScript, ядром которого является приложение React. Данные документов, все данные об их кластерах и эмбеддингах хранятся в IndexedDB, а все модели кэшируются в постоянной памяти браузера с помощью ServiceWorker, чтобы избежать их повторной загрузки. В этом исследовании использовалась квантованная модель Qwen 2.5 Instruct с параметрами 3B из MLC LLM, а также мультимодальная модель на основе SigLIP и многоязычная модель e5-small для встраивания текста из проекта Xenova. Кластеризация проводилась методом k-means из пакета ml-kmeans.

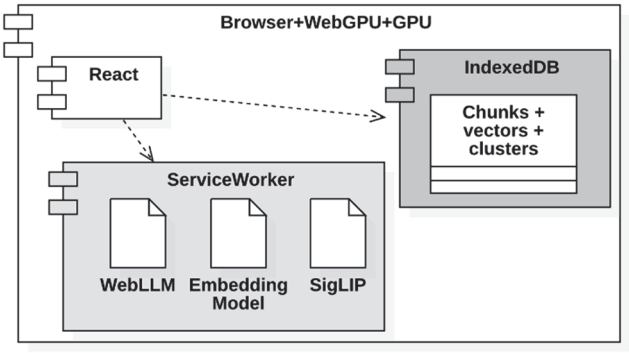


Рис. 1. Схема предложенной архитектуры

Подготовлен набор из 15 русскоязычных документов по веб-разработке и системному проектированию, содержащий 2694 фрагмента. В табл. 1 пред-

ставлены результаты поиска, полноты и точности для различных групп запросов. Для 60 запросов было размечено 293 фрагмента. Точность – это доля фрагментов, содержащих истинные предложения. Полнота для каждого запроса измеряет долю найденных релевантных предложений. Кластеризация и динамический порог в этом эксперименте не использовались.

Таблица 1

Результаты модуля поиска

Группа запросов	Полнота Recall	Точность Precision
Всего	0,490	0,202
Общие	0,476	0,175
Предметная область	0,499	0,223

На основе этого эксперимента из 60 вопросов был отобран список 21 из них, позволяющий проверить возможность поиска фрагментов в данных документах, а также запросы, ответы на которые выходили за рамки знаний предварительно обученной большой языковой модели (LLM). В описанных ниже экспериментах представлены результаты только для этих 21 запросов. Для каждого запроса было размечено от 4 до 8 релевантных фрагментов. Кроме того, для оценки точности поиска в систему были загружены тексты романа «Оливер Твист» на русском и английском языках.

В приведенной ниже табл. 2 представлены результаты выполнения этих запросов при загрузке в приложение разного количества предметно-ориентированных документов. В первом случае были загружены все 15 подготовленных документов, во втором – только 5 из них, а в двух последних эти документы не использовались. В последнем случае кластеризация не применялась, и, соответственно, динамический порог был зафиксирован на уровне 75 %. Результаты поиска существенно увеличивают количество токенов, подаваемых на вход модели, из-за чего процесс генерации занимает значительно больше времени. Повышение точности поиска сокращает число нерелевантных результатов и играет важную роль в определении времени генерации.

В случае использования полного набора документов средняя полнота составила 0,707, а средняя точность Precision – 0,310. Результаты показывают, что по мере уменьшения количества документов в системе точность Accuracy ее ответов также снижается. Для случая «без предметной области» значения точности и полноты можно принять равными 1, поскольку система не выдавала фрагменты, относящиеся к другим темам. В последнем же случае точность и полнота были приняты равными 0, так как все

найденные фрагменты относились к нерелевантным текстам. Внедрение динамического порога позволило незначительно сократить время поиска – с 0,16 до 0,11 с.

Таблица 2

Точность, время и количество токенов для различных документов, загруженных в приложение

Тип	Поиск (с)	Accuracy	RAG (с)	Вход	Выход	Кластеры
Все документы	1,35	0,86	51,47	2151	396	39
5 документов по теме	0,35	0,57	43,86	2197	365	24
Без документов по теме	0,11	0,48	8,18	104	225	14
Бее документов по теме и кластеризации	0,16	0,43	50,42	3094	304	1

В табл. 3 представлены усредненные результаты сравнения времени добавления документов для трех вариантов: без кластеризации, с кластеризацией и с использованием метода медоидов для создания краткого текста для медоида. Была проведена серия последовательных экспериментов, включавших постепенную загрузку новых документов и увеличение количества кластеров в приложении.

Таблица 3

Результаты обработки документов при загрузке в приложение

Тип обработки фрагментов	Время вычисления эмбеддингов для фрагмента (с)	Время постобработки на кластер (с)	Среднее время для документа (с)
Без кластеризации	0,565	0,116	93,636
С кластеризацией	0,568	0,056	94,968
Мультимодальный	0,560	3,870	195,666

Время постобработки включает кластеризацию, суммаризацию и использование мультимодальной модели. В связи с этим данное время указывается как среднее значение на один кластер. Если кластеризация не выполняется, система сохраняет один кластер, в который добавляются все фрагменты.

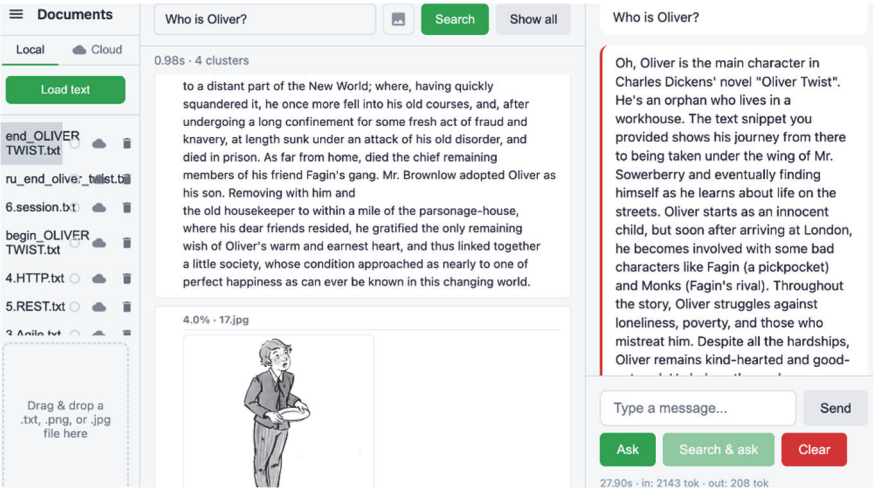


Рис. 2. Страница разработанного приложения с примерами работы

Интерфейс разработанного приложения (см. рис. 2) состоит из трех колонок: загруженные документы и изображения, результаты поиска и вопросы с ответами. Приложение поддерживает как текстовые запросы, так и ввод изображений. В этом примере фрагменты хорошо разделены на несколько кластеров, поэтому для вопроса используются только четыре из них, несмотря на большое количество загруженных документов. Поскольку вопрос короткий и на английском языке, в результаты поиска также включаются изображения. Однако следует отметить, что сходство между вопросом и изображением низкое, поэтому применяется низкий фиксированный порог сходства.

Обсуждение

Динамический порог существенно повысил точность поиска вопросов по документам из другой предметной области. Повышение точности позволило в несколько раз сократить объем входных данных генеративной модели, тем самым сократив время генерации ответа. Использование кластеризации и динамического порога сократило время поиска на 20% вопросов по другой предметной области.

Однако вопросы по одной и той же предметной области имеют меньшую точность поиска. В этом случае фрагменты очень похожи, что требует дальнейшего исследования. Следует отметить, что в последнем случае

ошибочные результаты поиска мало влияют на точность формируемых ответов. Генеративная модель чаще всего признает, что данные не имеют отношения к вопросу, но в некоторых вопросах все же были сгенерированы ошибочные ответы.

Время кластеризации зависит от количества кластеров и на два порядка меньше времени, необходимого для вычисления эмбеддингов. Однако при большом количестве кластеров это время существенно увеличивается, и количество этих операций необходимо ограничивать. Ограничение вычислений мультимодальный эмбеддингов медоидами кластеров значительно сокращает общее время вычислений. Однако следует отметить, что даже в этом случае общее время мультимодального поиска в разработанном приложении увеличилось вдвое. С увеличением числа фрагментов это время увеличивается медленнее, соответствуя числу кластеров. Необходимо повысить точность и скорость мультимодального поиска.

Следует отметить, что текущее приложение и экспериментальный набор ограничены по объему используемых данных. Использовано 15 документов, содержащих 2694 фрагмента. Поэтому автор предлагает продолжить исследование с новой архитектурой для будущих экспериментов, включающую веб-сервис и хранилище данных, чтобы анализировать данные большего количества экспериментов и разделять данные на батчи, проводить их дольше, чтобы предотвратить перегрев используемого процессора.

Выводы

Эта работа демонстрирует важную роль кластеризации для локальной мультимодальной системы RAG. Это позволяет использовать порог динамической фильтрации для повышения точности поиска и сокращения времени генерации LLM, а также ограничения объема вычислений, необходимых для мультимодальной модели. Однако остается множество вопросов, касающихся возможностей мультимодального поиска и точности поиска документов из одной предметной области, которые требуют дальнейшего исследования.

Список литературы

1. Ruan C.F., Qin Y., Zhou X., Lai R., Jin H., Dong Y., Hou B., Yu M.S., Zhai Y., Agarwal S., Cao H.: WebLLM. A High-Performance In-Browser LLM Inference Engine. 2024. arXiv preprint arXiv:2412.15803.

2. Wang, Z.J., Chau, D.H. MeMemo: on-device retrieval augmentation for private and personalized text generation. In Proceedings of the 47th International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval. 2024. P. 2765–2770.

3. Taran M.O., Revunkov G.I., Gapanyuk Y.E. Creating a Brief Review of Judicial Practice Using Clustering Methods // Studies in Computational Intelligence. 2023.

4. Haddad N., Myshenkov K.S., Afanasiev G.I. Introducing Text Analysis Algorithms in Decision Support Systems for Automated Evaluation of the Doctor Prescriptions // Proceedings of the 2024 6th International Youth Conference on Radio Electronics, Electrical and Power Engineering, REEPE 2024.

5. Kolomichyk I.V., Dzitiev V.V., Kanev A.I.: Information Retrieval System Based on the Knowledge Extraction // 2025 7th International Youth Conference on Radio Electronics, Electrical and Power Engineering (REEPE), Moscow, Russian Federation. 2025. P. 1–5.

6. Kanev A., Terekhov V. Evaluation issues of query result ranking for semantic search // Information technologies, telecommunications and control systems (ITTCS2020). 2020.

7. Martynyuk P. Experimental Study of Clustering Approaches for Text Embeddings // Proceedings-2025 International Russian Smart Industry Conference, SmartIndustryCon 2025.

8. Radford Alec, Kim Jong, Hallacy Chris, Ramesh Aditya, Goh Gabriel, Agarwal Sandhini, Sastry Girish, Askell Amanda, Mishkin Pamela, Clark Jack, Krueger Gretchen, Sutskever Ilya. Learning Transferable Visual Models From Natural Language Supervision. 2021.

9. Zhai X., Mustafa B., Kolesnikov A., Beyer L. Sigmoid Loss for Language Image Pre-Training. In: 2023 IEEE/CVF International Conference on Computer Vision (ICCV), Paris, France. 2023. P. 11941–11952.

C. LIANG, P.O.A. PRIBADI

Institute of Cybersecurity and Computer Science, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

lyan6.ch@edu.spbstu.ru, insanegame988@gmail.com

TRANAD-ENSEMBLE WITH TOP-K AGGREGATION FOR CRITICAL TRANSITION ANALYSIS IN COMPLEX SYSTEMS

This paper presents TranAD-E, a lightweight TranAD adaptation for early-warning anomaly detection. By integrating a learnable phase-output ensemble with adaptive top-k error aggregation, it prevents the dilution of localized anomaly signals. Benchmark evaluations demonstrate that TranAD-E achieves highly competitive performance against recent baselines. Crucially, it amplifies early pre-critical deviations with zero additional computational overhead, highlighting its practical value as a sensitive and cost-effective monitoring tool.

Keywords: *anomaly detection, multivariate time series, Transformer, TranAD, critical transitions, reconstruction error, top-k aggregation.*

Introduction

Complex systems such as industrial facilities, spacecraft telemetry channels, server machines, and physiological monitoring systems often exhibit abnormal temporal patterns before unstable or critical states. In practice, these signals are recorded as multivariate time series, where each timestamp contains several interacting variables. Detecting abnormal patterns in such data can support early-warning analysis and help identify possible pre-critical behavior before a larger system-level failure occurs.

Transformer-based neural architectures are useful for this task because they can model dependencies across time windows and variables. TranAD [1] is a compact Transformer-based anomaly-detection model that uses two reconstruction phases and a focus-score mechanism to emphasize suspicious deviations. However, when an anomaly appears only in a few variables, averaging reconstruction errors over all channels may dilute the local signal. Conversely, focusing only on the largest errors may ignore weak but distributed evidence.

This study proposes TranAD-E, a lightweight output-stage modification of TranAD. The proposed variant introduces a learnable ensemble of the two reconstruction outputs and applies top-k aggregation to emphasize the largest feature-wise errors. The main contribution is not a replacement of the TranAD architecture, but a cautious modification of the output and scoring stage for anomaly-based early-warning analysis. The paper evaluates the proposed variant on selected benchmark datasets and discusses both its potential benefits and limitations.

Problem statement

Let a multivariate time series be represented as follows, where T is the number of timestamps and m is the number of variables:

$$T = \{x_1, x_2, ..., x_T\},\ x_t \in R^m, \tag{1}$$

$$y_t \in \{0,1\}. \tag{2}$$

For each timestamp, the anomaly-detection task is to assign a binary label $y_t \in 0,1$. Here, $y_t = 1$ indicates anomalous behavior, while $y_t = 0$ indicates normal behavior. The model receives a sliding window of fixed length K and reconstructs it. The window can be written as:

$$W_t = \{x_{t-K+1}, \ldots, x_t\} \in R^{(K \times m)}. \quad (3)$$

A timestamp is considered suspicious when the reconstruction error is high. In the context of critical-transition analysis [2], this formulation does not directly forecast a transition horizon. Instead, it provides an operational early-warning proxy: abnormal reconstruction behavior may indicate localized or distributed pre-critical deviations.

Baseline tranad model

TranAD performs reconstruction-based anomaly detection using positional encoding, attention-based sequence representation, and two decoder phases. The first phase reconstructs the input window and produces O_1. Its reconstruction error is used as a focus score:

$$F = \|O_1 - W\|. \quad (4)$$

The model is then executed with focus information to obtain the second-phase reconstruction output O_2. The original inference score is computed as a balanced combination of the two reconstruction errors:

$$s_t = \frac{1}{2}\|O_1 - W\|_2^2 + \frac{1}{2}\|O_2 - W\|_2^2. \quad (5)$$

After anomaly scores are obtained, Peaks Over Threshold (POT) is used to select a decision threshold [3]. A timestamp is classified as anomalous when its score exceeds the threshold:

$$y_t = \|(s_t \geq \iota_{(POT)}). \quad (6)$$

This baseline is suitable for high-dimensional monitoring data because the focus mechanism can guide the second reconstruction phase toward abnormal subsequences. Nevertheless, the final score may still underuse the complementary information contained in the two output phases.

Proposed tranad-e with top-k aggregation

The proposed TranAD-E variant seen in fig. 1 keeps the encoder, window encoder, and decoder structure of the baseline model.

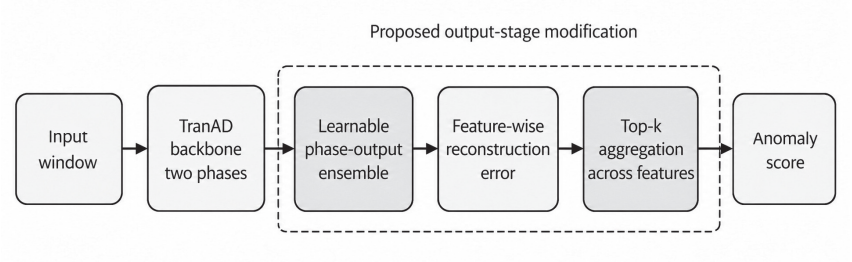


Fig. 1. Proposed TranAD-E architecture with learnable phase-output ensemble and top-k aggregation

The modification is added after the two reconstructed outputs. First, a learnable phase-output ensemble forms a blended reconstruction:

$$O^* = \alpha O_1 + (1-\alpha) O_2 . \quad (7)$$

The ensemble coefficient is constrained by a sigmoid transformation:

$$\alpha = \sigma(\theta), 0 < \alpha < 1 . \quad (8)$$

This parameter allows the model to balance the direct reconstruction and the focus-conditioned reconstruction. Next, feature-wise reconstruction errors are computed:

$$e_{t,j} = \left| O^*_{t,j} - W_{t,j} \right|, \; j = 1, 2, \ldots, m . \quad (9)$$

To reduce dilution of localized anomaly evidence, the timestamp-level score is obtained by averaging the largest k feature-wise errors:

$$s_t^{topk} = \frac{1}{k} \sum_{j \in TopK(e_{t,1}, e_{t,2}, \ldots, e_{t,m})} e_{t,j} . \quad (10)$$

This work adopts an adaptive top-k aggregation rule. For each candidate $k \in \{1, \ldots, d\}$, feature-wise reconstruction errors are scored as $s_t(k) = \frac{1}{k} \sum_{j \in TopK(e_t)} e_{t,j}$ and k^* is selected by maximizing validation F1 after POT thresholding. Thus, the score remains sensitive to localized early anomaly evidence while adapting k to each dataset.

Experimental setup

The proposed method was compared with representative anomaly-detection methods, including MERLIN [4], DAGMM [5], MSCRED [6], MAD-GAN [7], USAD [8], MTAD-GAT [9], CAE-M [10], GDN [11], TiTAD [12], XLinear [13] and the original TranAD. The comparison is based on the local implementation and processed datasets used in this study and therefore should not be interpreted as a direct reproduction of all previously published benchmark tables.

Experiments were conducted on selected benchmark datasets, including Synthetic[14], MBA [15], SMAP [16], and SMD [17]. These datasets cover physiological records, spacecraft telemetry, server-machine monitoring, and controlled synthetic anomaly patterns, which provide representative scenarios for multivariate reconstruction-based anomaly detection. Table 1 summarizes their key characteristics, where the values in parentheses denote the number of sequences in the dataset repository. For example, the SMAP dataset comprises 55 traces, each with 25 dimensions.

Table 1

Datasets used in the evaluation

Dataset	Train	Test	Dimensions	Anomalies
Synthetic	10000	10000	30(1)	6 %
MBA	100000	100000	2(8)	0.14 %
SMAP	135183	427617	25(55)	13.13 %
SMD	708405	708420	38(4)	4.16 %

All experiments were conducted in a Python 3.10 environment on an Apple M4 system with 24 GB of unified memory. The models were trained for 10 epochs using a batch size of 128, with Apple MPS acceleration used when supported. The evaluation metrics include Precision, Recall, F1, and AUC. Precision measures the proportion of predicted anomalies that are correct; recall measures the proportion of true anomalies that are detected; F1 is their harmonic mean, and AUC provides a threshold-independent evaluation of score quality.

Results and discussion

Table 2 presents an ablation study on Synthetic, MBA, and SMAP. The full TranAD-E variant combines the learnable phase-output ensemble with top-k ag-

gregation. The results indicate small but consistent F1 improvements on the reported datasets. The largest gain appears on SMAP, where localized anomaly evidence may be more effectively emphasized by the top-k rule.

Table 2

F1 comparison in the ablation study

Method	Synthetic(%)	MBA(%)	SMAP(%)
TranAD	97,52 ± 0,28	97,92 ± 0,16	91,15 ± 1,01
TranAD + top-k	98,50 ± 0,41	97,91 ± 0,16	91,09 ± 0,77
TranAD + learnable ensemble	97,32 ± 0,28	97,92 ± 0,17	90,75 ± 0,21
TranAD-E	98,54 ± 0,35	97,94 ± 0,15	91,17 ± 0,49

Tables 3–5 report the mean ± standard deviation of Precision, Recall, F1, and AUC over five independent runs. TranAD-E is compared with the original TranAD and representative baseline methods under the same local evaluation protocol. The results show that TranAD-E achieves competitive or improved F1 and AUC on most selected datasets, suggesting that adaptive top-k aggregation can strengthen reconstruction-based anomaly scoring while preserving the recall of the baseline model.

Table 3

Performance comparison on the Synthetic dataset

Method	P(%)	R(%)	F1(%)	AUC(%)
MERLIN	6,22 ± 0,00	66,25 ± 0,00	11,37 ± 0,00	57,94 ± 0,00
DAGMM	95,62 ± 0,00	100,00 ± 0,00	97,76 ± 0,00	99,88 ± 0,00
MSCRED	96,70 ± 0,38	100,00 ± 0,00	98,32 ± 0,20	99,91 ± 0,01
MAD-GAN	96,08 ± 0,99	100,00 ± 0,00	98,00 ± 0,51	99,90 ± 0,03
USAD	95,66 ± 0,09	100,00 ± 0,00	97,78 ± 0,04	99,89 ± 0,00
MTAD-GAT	80,01 ± 5,54	100,00 ± 0,00	88,81 ± 3,39	99,36 ± 0,21
CAE-M	95,89 ± 0,26	100,00 ± 0,00	97,90 ± 0,13	99,89 ± 0,01
GDN	97,01 ± 0,09	100,00 ± 0,00	98,48 ± 0,45	99,92 ± 0,00
TiTAD	94,87 ± 0,02	92,50 ± 0,00	93,67 ± 0,26	99,86 ± 0,02
XLinear	36,81 ± 0,13	89,79 ± 0,00	52,21 ± 0,07	92,20 ± 0,06
TranAD	95,17 ± 0,54	100,00 ± 0,00	97,52 ± 0,28	99,87 ± 0,02
TranAD-E	97,13 ± 0,67	100,00 ± 0,00	98,54 ± 0,35	99,93 ± 0,02

Table 4

Performance comparison on the MBA dataset

Method	P(%)	R(%)	F1(%)	AUC(%)
MERLIN	98,46 ± 0,00	4,92 ± 0,00	9,38 ± 0,00	52,44 ± 0,00
DAGMM	95,47 ± 0,66	100,00 ± 0,00	97,68 ± 0,35	98,62 ± 0,19
MSCRED	93,74 ± 1,09	100,00 ± 0,00	96,77 ± 0,58	98,74 ± 0,32
MAD-GAN	84,28 ± 2,14	100,00 ± 0,00	91,46 ± 1,26	95,21 ± 0,77
USAD	94,90 ± 3,59	100,00 ± 0,00	97,35 ± 1,93	98,59 ± 1,07
MTAD-GAT	89,35 ± 1,11	100,00 ± 0,00	94,37 ± 0,62	96,94 ± 0,36
CAE-M	87,42 ± 4,49	100,00 ± 0,00	93,24 ± 2,48	96,26 ± 1,41
GDN	85,17 ± 0,28	100,00 ± 0,00	91,99 ± 0,16	95,55 ± 0,10
TiTAD	33,81 ± 1,13	99,88 ± 0,00	50,52 ± 0,51	54,63 ± 1,05
XLinear	33,81 ± 0,88	99,78 ± 0,00	50,45 ± 0,15	56,83 ± 0,31
TranAD	95,93 ± 0,31	100,00 ± 0,00	97,92 ± 0,16	98,91 ± 0,09
TranAD-E	95,97 ± 0,29	100,00 ± 0,00	97,94 ± 0,15	98,93 ± 0,08

Table 5

Performance comparison on the SMAP dataset

Method	P(%)	R(%)	F1(%)	AUC(%)
MERLIN	10,14 ± 0,00	15,51 ± 0,00	12,26 ± 0,00	51,13 ± 0,00
DAGMM	81,36 ± 0,44	100,00 ± 0,00	89,72 ± 0,27	98,90 ± 0,03
MSCRED	81,67 ± 1,13	100,00 ± 0,00	89,91 ± 0,69	98,92 ± 0,08
MAD-GAN	81,70 ± 0,50	100,00 ± 0,00	89,93 ± 0,30	98,92 ± 0,04
USAD	82,75 ± 1,06	100,00 ± 0,00	90,56 ± 0,63	98,99 ± 0,07
MTAD-GAT	75,94 ± 0,66	100,00 ± 0,00	86,33 ± 0,43	98,47 ± 0,06
CAE-M	82,29 ± 0,52	100,00 ± 0,00	90,28 ± 0,31	98,96 ± 0,04
GDN	82,87 ± 1,72	100,00 ± 0,00	90,63 ± 0,21	99,00 ± 0,03
TiTAD	37,41 ± 0,54	42,61 ± 0,00	39,84 ± 0,21	62,86 ± 0,02
XLinear	13,85 ± 0,87	99,61 ± 0,00	22,93 ± 0,31	38,87 ± 0,05
TranAD	83,75 ± 1,72	100,00 ± 0,00	91,15 ± 1,01	99,06 ± 0,12
TranAD-E	83,77 ± 0,83	100,00 ± 0,00	91,17 ± 0,49	99,07 ± 0,06

The results suggest that top-k aggregation is most useful when anomaly evidence is concentrated in a limited number of variables. On Synthetic and MBA, TranAD-E preserves the strong baseline performance. On SMAP, it provides a moderate F1 gain. However, the method may be less suitable when anomalies are weak and distributed across many channels, because selecting only the largest feature-wise errors can underuse system-level evidence.

Table 6

Inference latency (ms/batch, batch size 128, evaluated over 100 batches)

Method	Synthetic	MBA	SMAT
MERLIN	36,99 ± 7,47	26,55 ± 11,82	37,80 ± 9,73
DAGMM	5,76 ± 0,46	5,30 ± 0,10	5,76 ± 0,38
MSCRED	712,01 ± 17,58	38,89 ± 3,91	615,76 ± 23,97
MAD-GAN	5,90 ± 0,64	5,27 ± 0,17	6,04 ± 0,38
USAD	8,15 ± 0,23	7,40 ± 0,29	9,15 ± 0,97
MTAD-GAT	179,68 ± 0,98	77,99 ± 0,49	124,38 ± 2,36
CAE-M	45,02 ± 3,02	9,13 ± 1,30	39,33 ± 4,23
GDN	54,21 ± 0,76	40,73 ± 0,36	50,14 ± 1,75
TiTAD	11,03 ± 5,44	11,89 ± 5,62	15,46 ± 2,15
XLinear	0,98 ± 0,58	0,37 ± 0,36	0,49 ± 0,22
TranAD	4,93 ± 0,53	0,97 ± 0,46	4,62 ± 0,99
TranAD-E	4,93 ± 0,56	0,82 ± 0,32	4,61 ± 0,90

Table 6 compares inference latency across models to confirms TranAD-E's lightweight nature. TranAD-E introduces virtually no computational overhead over baseline model, as output-stage ensemble and top-k aggregation require negligible computation while remaining orders of magnitude faster than heavy baselines like MTAD-GAT and MSCRED.

Fig. 2 presents a qualitative visualization on the SMD dataset. The bottom ribbons show that the predicted anomaly region closely aligns with the ground truth, indicating strong overall detection performance. Furthermore, to illustrate the early-warning behavior, initial deviations at the onset of the anomalous interval (around step 15850) emerge in only a few variables (e.g., Features 12 and 14). While averaging across all channels dilutes such signals, the top-k aggregation preserves them, allowing the anomaly score to cross the POT threshold at the very start of the anomalous interval. This localized sensitivity supports the model's capacity for early-warning analysis.

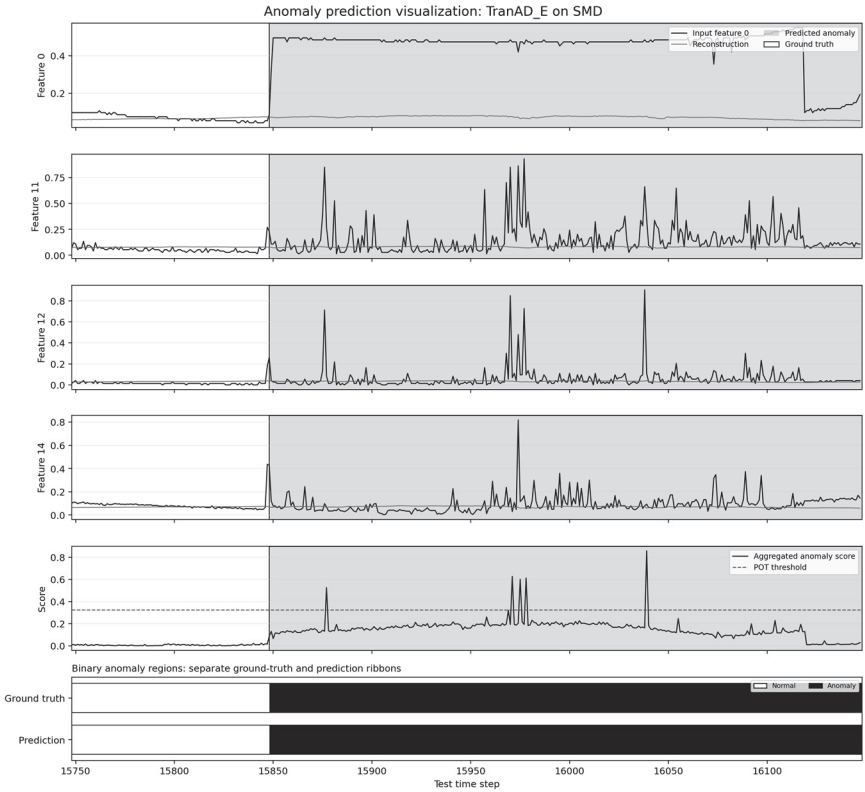


Fig. 2. Anomaly prediction visualization of TranAD-E with top-k aggregation on the SMD dataset

Conclusion

This study presented TranAD-E, a highly efficient modification of the TranAD architecture for anomaly-based early-warning analysis in complex systems. By integrating a learnable phase-output ensemble with adaptive top-k feature-wise aggregation, the model effectively mitigates the dilution of weak, localized anomaly signals. The experiments confirm that TranAD-E maintains strong detection capabilities. More importantly, it successfully amplifies early-warning evidence at the onset of critical transitions with virtually zero computational overhead, proving its exceptional practical viability for resource-constrained, real-time industrial monitoring. Future work will explore deploying the

model on edge devices and investigating its cross-domain transferability in broader industrial applications.

References

1. Tuli S., Casale G., Jennings N.R. TranAD: Deep Transformer Networks for Anomaly Detection in Multivariate Time Series Data // Proceedings of the VLDB Endowment. 2022. Vol. 15. No. 6. P. 1201–1214.

2. Shaheen T., Gebel E. Cross-Condition Bearing Prognostics Using Early Warning Signal Features: A Comparative Study of Attention Mechanisms and SHAP-Based Spectral Attribution // Iranian Journal of Science and Technology, Transactions of Electrical Engineering. 2026. DOI: 10.1007/s40998-026-01101-7.

3. Siffer A., Fouque P.-A., Termier A., Largouet C. Anomaly Detection in Streams with Extreme Value Theory // Proceedings of the 23rd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. 2017. P. 1067–1075.

4. Nakamura T., Imamura M., Mercer R., Keogh E. MERLIN: Parameter-Free Discovery of Arbitrary Length Anomalies in Massive Time Series Archives // IEEE International Conference on Data Mining. 2020. P. 1190–1195.

5. Zong B., Song Q., Min M.R., Cheng W., Lumezanu C., Cho D., Chen H. Deep Autoencoding Gaussian Mixture Model for Unsupervised Anomaly Detection // International Conference on Learning Representations. 2018.

6. Zhang C., Song D., Chen Y., Feng C., Lumezanu C., Cheng W., Ni J., Zong B., Chen H., Chawla N.V. A Deep Neural Network for Unsupervised Anomaly Detection and Diagnosis in Multivariate Time Series Data // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2019. Vol. 33. P. 1409–1416.

7. Li D., Chen D., Jin B., Shi L., Goh J., Ng S.-K. MAD-GAN: Multivariate Anomaly Detection for Time Series Data with Generative Adversarial Networks // International Conference on Artificial Neural Networks. 2019. P. 703–716.

8. Audibert J., Michiardi P., Guyard F., Marti S., Zuluaga M.A. USAD: UnSupervised Anomaly Detection on Multivariate Time Series // Proceedings of the 26th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. 2020. P. 3395–3404.

9. Zhao H., Wang Y., Duan J., Huang C., Cao D., Tong Y., Xu B., Bai J., Tong J., Zhang Q. Multivariate Time-Series Anomaly Detection via Graph Attention Network // IEEE International Conference on Data Mining. 2020.

10. Zhang Y., Chen Y., Wang J., Pan Z. Unsupervised Deep Anomaly Detection for Multi-Sensor Time-Series Signals // IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering. 2021.

11. Deng A., Hooi B. Graph Neural Network-Based Anomaly Detection in Multivariate Time Series // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2021. Vol. 35. P. 4027–4035.

12. Liu Y., Wang W., Wu Y. TiTAD: Time-Invariant Transformer for Multivariate Time Series Anomaly Detection // Electronics. 2025. Vol. 14. No. 7. P. 1401.

13. Chen X., Jin H., Huang Y., Feng Z. XLinear: A Lightweight and Accurate MLP-Based Model for Long-Term Time Series Forecasting with Exogenous Inputs // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2026. Vol. 40. No. 24. P. 20325–20335.

14. Yahoo Webscope. S5-A Labeled Anomaly Detection Dataset, Version 1.0. 2021.
15. Moody G.B., Mark R.G. The Impact of the MIT-BIH Arrhythmia Database // IEEE Engineering in Medicine and Biology Magazine. 2001. Vol. 20. No. 3. P. 45–50.
16. Hundman K., Constantinou V., Laporte C., Colwell I., Soderstrom T. Detecting Spacecraft Anomalies Using LSTMs and Nonparametric Dynamic Thresholding // Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. 2018. P. 387–395.
17. Su Y., Zhao Y., Niu C., Liu R., Sun W., Pei D. Robust Anomaly Detection for Multivariate Time Series Through Stochastic Recurrent Neural Network // Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. 2019. P. 2828–2837.

Ф.А. ЮДКИН, А.А. ФИРСОВ*, А.А. ОРАНОВ
НИЦ «Курчатовский институт» – НИИСИ, Москва
*a.firsov@niisi.ras.ru

РАСПРЕДЕЛЕННАЯ НЕЙРОМОРФНАЯ СИСТЕМА ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ НА ОСНОВЕ ПЛАНАРНЫХ МЕМРИСТОРНЫХ СТРУКТУР

Нейроморфные сети являются актуальной темой исследований в последние годы. Большинство существующих реализаций основаны на гибридных структурах, включающих в себя кросс-бары с мемристорами и классические комплементарные структуры металл-оксид-полупроводник, что накладывает на них ряд ограничений, делающие их малоперспективными. В данной работе рассмотрена возможность создания распределенной нейроморфной системы управления на основе планарных мемристивных структур. Предложена модульная реализация: полносвязная нейронная сеть путём прореживания синапсов разделена на функциональные блоки, выполняющие конкретные операции. Такое решение позволяет уменьшить количество перекрёстных связей и даёт возможность реализовать нейроморфную сеть аппаратно. Для двух нелинейных задач проведено компьютерное моделирование, которое показало работоспособность планарных структур. Проведены испытания этих структур на устойчивость к вариации параметров. Реализованная нейроморфная схема пригодна для обучения по методу обратного распространения ошибки. В предложенной архитектуре принципиально возможно решение задачи рефлекторно (за один такт), в отличие от компьютерной симуляции нейросетей.

Ключевые слова: *мемристор, паразитные токи, нейросеть, разреженная планарная архитектура, система принятия решений.*

Введение

Моделирование работы коры головного мозга человека долгие годы является одной из центральных проблем мирового научного сообщества. Принцип работы мозга существенно отличается от основополагающих принципов работы современных компьютеров. Главным отличием является разделение компонент, отвечающих за вычислительные процессы и за хранение памяти. Любая операция в компьютере включает в себя передачу данных между этими структурными единицами. В архитектуре мозга, напротив, память и обработка информации тесно связаны. История всех произошедших событий хранится в синаптических связях, которые непосредственно прилегают к нейрону. Производные этой естественной биологической архитектуры, известные как искусственные нейронные сети, активно исследуются с момента появления информатики. В последнее время предпринимается множество попыток создания нейроморфных микрочипов, устроенных по принципу нейронных сетей. Такая архитектура позволит резко увеличить производительность компьютеров в задачах, близких машинному обучению. Первоначально термин «нейроморфный» был придуман Карвером Мидом в 1990 году [1] и использовался именно для описания нейросистем на основе элементов КМОП структуры [2–4]. Однако в последнее время использование этого термина было расширено для обозначения гибридных аналогового-цифровых электронных систем [5, 6], эмулирующих работу мозга. Разработка новых направлений нейроморфной процессорной техники является актуальной задачей.

Несмотря на большой прогресс в технологии изготовления полупроводниковых интегральных микросхем, современные микропроцессоры приближаются к пределам своей производительности. Искусственные нейронные сети корректно эмулируют работу нейронов, однако, большая часть площади чипа и энергии неэффективно расходуются схемами КМОП структур, которые играют роль искусственных синапсов. Именно грамотная реализация работы синапса играет ключевую роль в конструировании нейроморфного оборудования. В работах [7–9] было показано, что для аппаратной реализации синапса нейрона и, следовательно, достижения симбиоза процессов хранения памяти и проведения вычислений может быть использован всего один элемент электрической цепи – мемристор [10-12]. Мемристивные нейронные сети [13,14] (MNNs от англ. Memristive Neural

Networks) и принципы их конструирования [16–19] активно изучаются исследователями со всего мира. Основная идея построения когнитивного оборудования на основе мемристоров состоит в том, чтобы хранить синаптические веса в качестве их состояний проводимости и на месте осуществлять соответствующие вычислительные задачи. Наибольшее число успешных реализаций MNNs базируется на структуре кросс-бара [20,21]. Мемристивные кроссбары успешно решают простейшие задачи классификации [22, 23], регрессии [13], реализации свёрточных слоёв глубоких нейронных сетей [24]. Однако, структура типа кросс-бар с мемристорами имеет ряд недостатков [25, 26]. Одной из важнейших проблем является паразитное сопротивление, возникающее из-за полносвязности структуры. Именно оно является лимитирующим фактором для масштабирования кросс-барных мемристивных сетей [27–30]. Кроме того, в большинстве существующих реализаций настраиваемая проводимость мемристоров используется в качестве синаптических весов, а функции обработки сигналов по-прежнему реализованы элементами КМОП структур. Теоретически нелинейные вольт-амперные кривые металл-оксидных мемристоров позволяют работать и без транзисторов. В последнее время появились примеры реализаций нейроморфных сетей, полностью основанных на мемристорах [31–33]. Тем не менее проблема масштабирования до сих пор остаётся не решённой, на ряду с технологическими усовершенствованиями в процессе изготовления мемристоров необходимо вести разработку новых архитектур для нейроморфных чипов.

Целью данной работы является построение новой модели нейроморфной сети на двухполюсниках, полностью состоящей из мемристоров, без использования элементов КМОП структур. Эта сеть должна быть пригодна для последующей физической реализации. На первом этапе предлагается модульная реализация: полносвязная нейронная сеть путём прореживания синапсов разделена на функциональные блоки, выполняющие конкретные операции. На втором этапе проводится компьютерное моделирование, демонстрирующее возможности планарной структуры для решения нелинейных задач, устойчивость к флуктуациям параметров. В будущем планируется третий этап, на котором разработанная схема реализуется физически применительно к решению задачи аналогового управления подвижным механизмом.

Проблема паразитного сопротивления

В большинстве работ кроссбар с мемристорами используется в качестве матрицы весов для построения полносвязной нейронной сети. Однако в такой сети (рис. 1) полное число связей между нейронами быстро возрастает

при увеличении числа входов. Большое число связей между мемристорами приводит к возникновению существенных трудностей. На рис. 2 представлен типичный кроссбарный массив из мемристоров и его эквивалентная схема. Из рисунка 2 видно, что при существенной разнице напряжений, ток практически не будет протекать по отдельным участкам цепи. В процессе обучения напряжение прикладывается к конкретному элементу массива с сопротивлением *Rij*, однако, все оставшиеся *N-1* элементы, а также внутренние сопротивления источников и приёмников сигнала, подключенные параллельно, вносят свой вклад в виде добавочного сопротивления *Rдоб*. Величина добавочной проводимости растёт с увеличением числа мемристоров в кроссбаре и, начиная с некоторого числа мемристоров *M*, её значение превышает отношение проводимостей целевого мемристора во включенном и выключенном состояниях, что делает процесс обучения невозможным. Именно это становится причиной некорректной работы кроссбарных мемристивных систем при их масштабировании.

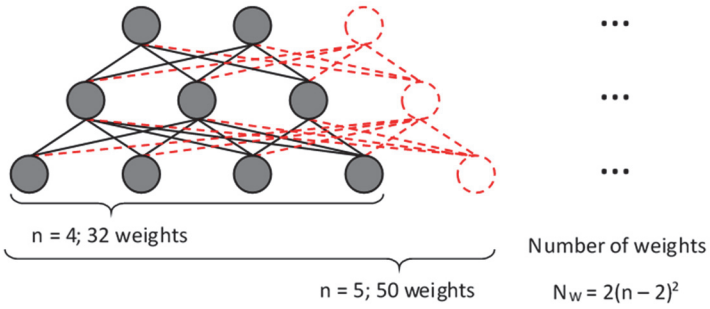


Рис. 1. Картина трёхслойной полносвязной нейронной сети. Общее количество связей возрастает пропорционально квадрату числа нейронов во входном слое

Существует большое количество способов уменьшения числа связей в искусственных нейросетях: прореживание, дроп-аут и т.д. Тем не менее, использование данных методов подразумевает обучение модели нейроморфной сети на компьютере и её дальнейшую физическую реализацию с уже известными параметрами весов и пороговых значений активационных функций нейронов, что лишает концепцию универсальности и технологически неудобно, поскольку под каждую новую задачу нужно изготавливать новую нейроморфную сеть. Более рациональным способом будет ограничить число связей структурно.

Мы предлагаем распределенную структуру аналоговой нейроморфной сети, полностью основанной на мемристорах, минимальными структурными единицами которой являются нейроны с двумя синапсами. Использование планарных блоков, выполняющих конкретные операции позволит нам уменьшить влияние паразитных токов и упростит физическую реализацию. Под распределённой системой принятия решений в данной работе понимается архитектура, в которой функции обработки сигналов распределены между автономными функциональными блоками, каждый из которых реализован на базе минимальных нейронных структур. Для физической реализации предложенной структурной модели необходимо корректно подобрать элементы, выполняющие роль тел и синапсов нейронов.

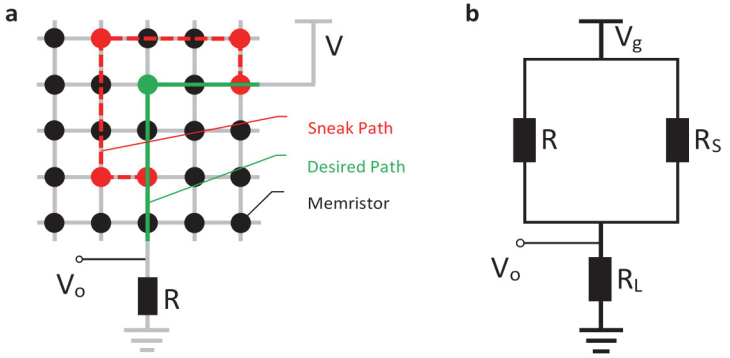


Рис. 2. Паразитное напряжение в кроссбаре: a – путь тока утечки в участке мемристивного кроссбара; b – эквивалентная электрическая схема

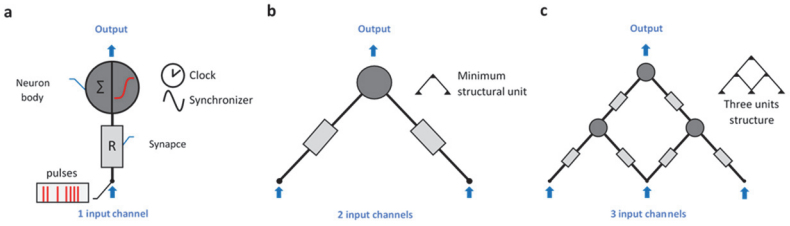


Рис. 3. Предлагаемая модель нейрона: a – минимально возможная конфигурация нейрона с одним входным и выходным каналом соответственно; b – минимальная структурная единица, пригодная для построения нейроморфной сети; c – пример нейроструктуры, состоящей из трёх минимальных структурных единиц

В пределе функцию нейрона может выполнять конструкция всего из двух мемристоров разных типов (рис. 3a). Такой элемент представляет собой простой сумматор и способен успешно выполнять роль часов (по числу прошедших импульсов) или синхронизирующего устройства. Минимальное число мемристоров, необходимое для создания описанных выше структур (рис. 3c) – три. Один мемристор выполняет роль тела нейрона, два других – синапсов. Модель такой минимальной структурной единицы представлена на рисунке 3b.

Для корректного функционирования описанной структуры как аналоговой нейроморфной сети, она должна работать в импульсном режиме. Сеть должна состоять из мемристоров двух разных типов. Технологически это позволяет реализовать всю структуру нейроморфной сети в одном слое, поскольку вся она будет состоять из идентичных структурных единиц (рис. 4a). Мемристор, представляющий тело нейрона – низкоомный мемристор, играющий роль интегратора, который суммирует поступающие на вход импульсы (рис. 4b). Его ВАХ можно поставить в соответствие активационной функции нейрона, которая схематически изображена в виде сигмоиды на рис. 4c. Это решение позволяет максимально приблизить работу конструируемой нейроморфной сети к работе живых нейронов. Синаптический мемристор – высокоомный мемристор с памятью, сопротивление которого меняется в зависимости от суммарной энергии входных сигналов (рис. 4d).

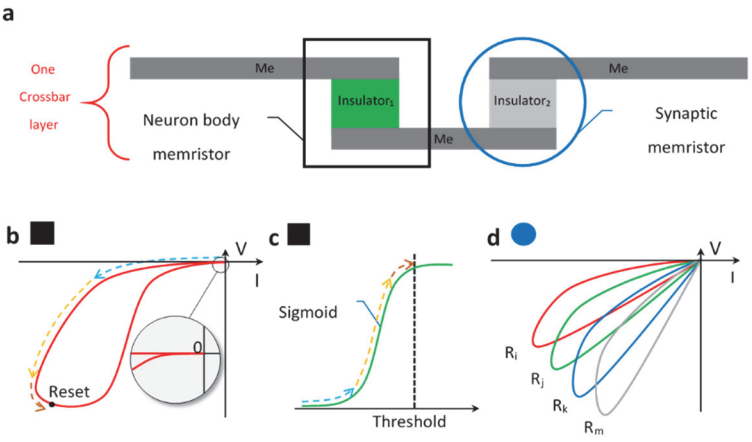


Рис. 4. Реализация нейрона в структуре кроссбара: a – вид нейрона сбоку; b – ВАХ низкоомного мемристора, выполняющего функцию тела нейрона; c – активационная функция нейрона; d – ВАХ высокоомного мемристора, выполняющего роль синапса

Таким образом в предлагаемой структуре, за счёт минимально возможного числа связей в нейроне (всего 2 синапса), у любой конфигурации данных нейронов общее число связей значительно меньшем чем в аналогичной полносвязной сети. Кроме того, синапсы представлены высокоомными мемристорами, что облегчает процесс обучения и потенциально уменьшает влияние паразитных токов при масштабировании по сравнению с классическим кроссбаром, однако количественные границы масштабируемости требуют дальнейшего исследования.

В предлагаемой модели мы сознательно ограничиваем число синапсов нейрона до минимально допустимого со структурной точки зрения значения (рис. 5a). Это решение существенно сокращает общее число связей в сети и, следовательно, даёт ряд преимуществ в сравнении с классической кросс-барной полносвязной структурой. Во-первых, частично решена проблема паразитных связей. Во-вторых, данная конструкция нейрона предоставляет возможность создания различных структурных единиц (рис. 5b). Несмотря на простоту изначальной концепции, она позволяет конструировать сложные нейроморфные сети из предложенных структурных единиц, каждая из которых выполняет роль отдельного функционального блока (рис. 5c).

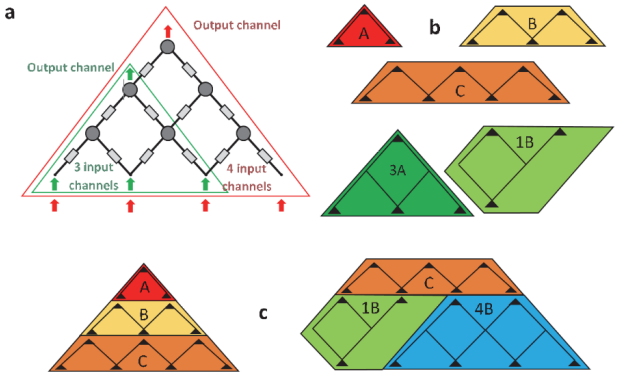


Рис. 5. Структурные единицы нейроморфной сети: a – вариации нейронов с разным числом входов; b – пример структурного «алфавита»; d – пример сборки структур из «алфавита»

Моделирование

Для проверки работоспособности концепции плоской неполносвязной сети для решения простых задач, были рассмотрены два примера: задача определения четности на трех битах (Parity-3) и задача «машинка в лабиринте». Для обеих задач было определено минимальное количество элементов, с помощью которого ее можно решить, на основе обучающей выборки было проведено обучение модели с учителем при помощи обратного распространения ошибки и градиентного спуска (градиенты для нестандартной архитектуры вычислялись аналитически). Так как конечная цель – физическая реализация архитектуры, были проведены испытания устойчивости к вариациям параметров (как синапсов, так и тела нейрона).

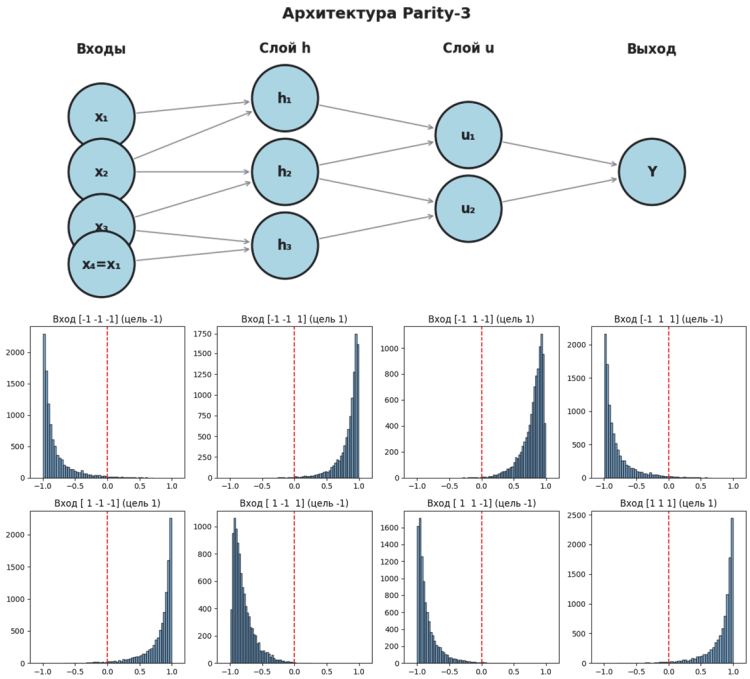


Рис. 6. Архитектура для решения задачи определения четности на трех битах (сверху). Тест на устойчивость к флуктуациям параметров (снизу)

Моделирование проведено на Python в среде Google Colab. Код написан без применения библиотек автоматического дифференцирования

(TensorFlow, PyTorch), что позволило полностью контролировать архитектуру сети и процесс обучения, а также в перспективе упростит перенос весов на физическую мемристорную модель. Веса сети определялись путём минимизации среднеквадратичной ошибки на обучающей выборке из 8 примеров с помощью алгоритма градиентного спуска.

На рис. 6 (верхняя часть) представлена архитектура, которую мы использовали для решения задачи Parity-3. 4 входа, два скрытых слоя и один выход. В нижней части рисунка приведены результаты тысяча испытаний системы с вариацией параметров в пределах 10 процентов о идеального значения. Для этого примера мы взяли большое отклонение, чтобы продемонстрировать, что даже в этом случае архитектура с достаточной для многих приложений точностью справляется с поставленной задачей. Минимальная точность одного запроса получается более 98 %. Вероятность безошибочной работы (правильный ответ на все восемь входных векторов) 93 %.

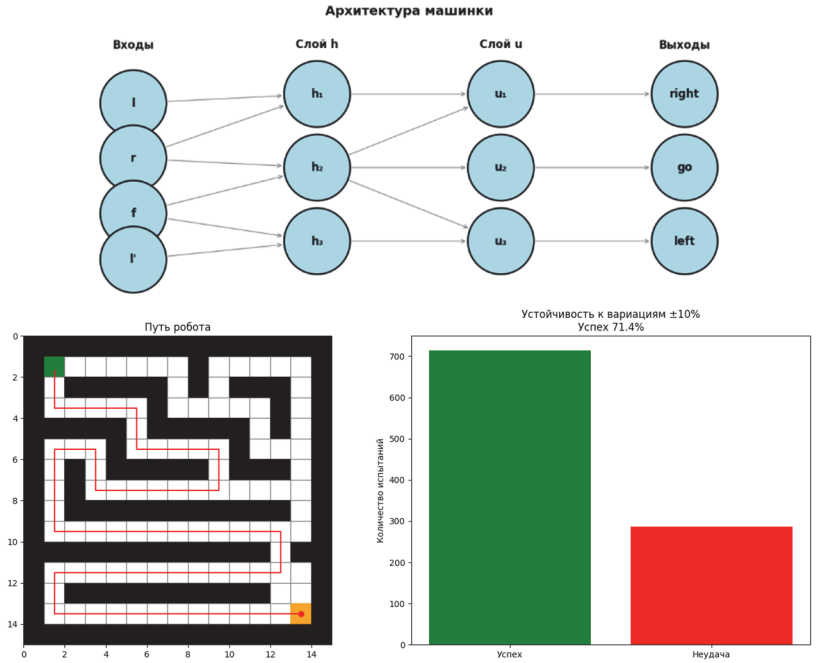


Рис. 7. Архитектура для решения задачи «машинка в лабиринте» (сверху). Лабиринт и результат теста на устойчивость к флуктуациям параметров (снизу)

На рис. 7 (верхняя часть) представлена архитектура, которую мы использовали для решения задачи с машинкой в лабиринте. Как и в первом примере, для решения поставленной задачи при сохранении однослойности архитектуры, мы добавили дублирующий четвертый вход. В обеих задачах каждый нейрон действует как интегратор с нелинейной активацией. Входной сигнал – это взвешенная сумма сигналов с предыдущего слоя плюс смещение, затем применяется функция активации (в нашем случае, tanh). Каждый синапс – это мемристор с проводимостью, пропорциональной весу. Входное напряжение умножается на проводимость, давая ток. Токи суммируются в общем узле. Тело нейрона – это мемристор-интегратор, который преобразует суммарный ток в напряжение по сигмоидной характеристике, близкой к tanh. Bias реализуется как дополнительный синапс от постоянного напряжения +1V. В нашей модели мы использовали идеальный tanh, но в реальности он будет немного отличаться, поэтому в тестах на устойчивость работоспособности системы мы варьировали как установленные веса (синапсы), так и tanh (тело нейрона).

Обучающая выборка в случае с лабиринтом основана на принципе «стена всегда справа». На данном этапе мы упростили задачу. Лабиринт квадратный, дискретный, нахождение машинки между клетками невозможно, то есть продвижение машинки – тоже дискретное, пошаговое (Рисунок 7, нижняя часть). У машинки три датчика наличия стены (слева, справа, впереди). Эту архитектуру мы проверили на устойчивость к флуктуациям параметров в 10 %. Из тысячи испытаний, финиш был достигнут в 71 % случаев, что было бы достаточно для многих задач. Если усложнить архитектуру, добавив нейроны в скрытые слои, можно значительно улучшить результат. Но в данном примере акцент был сделан на минимизацию достаточной для решения задачи архитектуры. Без вариации параметров, после обучения, обе архитектуры решают свою задачу со 100 %-й вероятностью. Мы можем сделать вывод, что разреженная пирамидальная архитектура с перекрывающимися окнами: способна решать нелинейные задачи, может управлять поведением агента в среде, сохраняет работоспособность при умеренных отклонениях параметров.

В данной работе показано качественное уменьшение числа связей и, как следствие, паразитных путей. Количественное сравнение предложенной архитектуры с полносвязной сетью является предметом дальнейших исследований.

Выводы

В данной работе предложена структура аналоговой нейроморфной сети, полностью основанной на мемристорах, минимальными структурными единицами которой являются нейроны с двумя синапсами. Это решение

позволяет разбивать полносвязные нейронные сети на структурные составляющие, выполняющие роль функциональных блоков. Кроме того, в данном подходе к конструированию нейроморфных сетей число синаптических связей между мемристорами значительно уменьшено в сравнении с классическим мемристивным кросс-барром, в следствии чего паразитное падение напряжения, являющееся критически важным фактором для аналоговой нейросети, оказывает значительно меньшее влияние на работу устройства. Важным аспектом предложенной концепции является то, что данные нейроморфные структуры теоретически можно реализовать в одном слое, существенно упростив технологический процесс. Кроме того, каждый структурный элемент такой системы будет решать свою задачу рефлекторно, за один такт. Однако, стоит отметить, что практическая реализация требует решения технологических вопросов совместимости мемристоров двух типов в одном слое.

Было установлено, что нейроморфная сеть, построенная на описанной структуре, сможет функционировать, если тело нейрона и синапсы будут реализованы с помощью мемристоров двух разных типов. Роль тела нейрона играет низкоомный мемристор без памяти, участок вольт-амперной характеристики которого можно поставить в соответствие активационной функции реального нейрона головного мозга, синапс представлен высокоомным запоминающим мемристором. Устройства с такими характеристиками существуют в физическом исполнении, что в дальнейшем позволит реализовать сеть аппаратно.

На примере двух нелинейных задач, разработаны плоские нейросетевые архитектуры для их решения. Работоспособность моделей проверена путём симуляции с учётом вариаций параметров, имитирующих технологический разброс мемристоров. Обе предложенные архитектуры показали достаточную для многих задач устойчивость к вариации параметров и 100%-е решение задачи с идеальными весами. Проведённое математическое моделирование предложенной сети показывает её пригодность к обучению по методу обратного распространения ошибки. Тем самым продемонстрирована жизнеспособность полностью мемристорных нейроморфных сетей без использования КМОП-структур. Плотность таких сетей зависит только от физических пределов минимального размера мемристора, что может представлять интерес для дальнейшей разработки автономных систем управления после физической верификации предложенной архитектуры.

Благодарности

Работа выполнена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» – НИИСИ по теме № FNEF-2024-0001.

Список литературы

1. Mead C. Neuromorphic electronic systems // Proceedings of the IEEE. 1990. Vol. 78(10). P. 1629–1636. DOI: 10.1109/5.58356.

2. Schemmel J. et al. A wafer-scale neuromorphic hardware system for largescale neural modeling // Proc. IEEE International Symposium on Circuits and Systems (ISCAS). 2010. P. 1947–1950.

3. Painkras E. et al. SpiNNaker: a 1-W 18-core system-on-chip for massivelyparallel neural network simulation // IEEE J. Solid-State Circuits. 2013. Vol. 48. P. 1943–1953.

4. Merolla P.A. et al. A million spiking-neuron integrated circuit with a scalable communication network and interface // Science. 2014. Vol. 345. Issue 6197. P. 668–673.

5. Strukov D., Stewart D., Borghetti J., Li X., Pickett M., Medeiros-Ribeiro G., Robinett W., Snider G., Strachan J.P., Wu W., Xia Q., Yang J.J., Williams S. Hybrid CMOS/memristor circuits // IEEE International Symposium on Circuits and Systems (ISCAS). 2010. P. 1967–1970. DOI: 10.1109/ISCAS.2010.5537020.

6. Camuñas-Mesa L., Linares-Barranco B., Serrano-Gotarredona T. Neuromorphic Spiking Neural Networks and Their Memristor-CMOS Hardware Implementations // Materials. 2019. Vol. 12(17). P. 2745. DOI: 10.3390/ma12172745.

7. Indiveri G., Linares-Barranco B., Legenstein R., Deligeorgis G., & Prodromakis T. Integration of nanoscale memristor synapses in neuromorphic computing architectures // Nanotechnology. 2013. Vol. 24(38). P. 384010. DOI:10.1088/0957-4484/24/38/384010.

8. Di Ventra M., Pershin Y. The parallel approach // Nature Physics. 2013. Vol. 9. P. 200–202 DOI: 10.1038/nphys2566.

9. Di Ventra M., Pershin Y. Memcomputing: a computing paradigm to store and process information on the same physical platform // arXiv:1211.4487. 2013.

10. Strukov D. B., Snider G. S., Stewart D. R. & Williams, R. S. The missing memristor found // Nature. 2008. Vol. 453. P. 80–83.

11. Chua L. Resistance switching memories are memristors // Applied Physics A. 2011. Vol. 102. P. 765–783. DOI: 10.1007/s00339-011-6264-9.

12. Wong H. S. P., Salahuddin S. Memory leads the way to better computing // Nat. Nanotech. 2015. Vol. 10. P. 191–194.

13. Liang H. *et al*. Memristive Neural Networks: A Neuromorphic Paradigm for Extreme Learning Machine // IEEE Transactions on Emerging Topics in Computational Intelligence. 2019. Vol. 3(1). P. 15–23. DOI: 10.1109/TETCI.2018.2849721.

14. Tang Z., Zhu R., Lin P., He J., Wang H., Huang Q, Ma Q. A hardware friendly unsupervised memristive neural network with weight sharing mechanism // Neurocomputing. 2019. Vol. 332. P.193–202. DOI: 10.1016/j.neucom.2018.12.049.

15. Yang Y. Spiking Neurons with Spatiotemporal Dynamics and Gain Modulation for Monolithically Integrated Memristive Neural Networks // Nature Communications. 2020. Vol. 11. P. 3399. DOI: 10.1038/s41467-020-17215-3.

16. Sung C., Hwang H., & Yoo I. K. Perspective: A review on memristive hardware for neuromorphic computation // Journal of Applied Physics. 2018. Vol. 124(15). P. 151903. DOI: 10.1063/1.5037835.

17. Krestinskaya O., James A.P. and Chua L.O. Neuro-memristive Circuits for Edge Computing: A Review // IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems. 2020. Vol. 31(1). P. 4–23. DOI: 10.1109/TNNLS.2019.2899262.

18. Borghetti J., Snider G.S., Kuekes P.J., Yang J.J., Stewart D.R. & Williams, R.S. «Memristive» switches enable "stateful" logic operations via material implication // Nature. 2010. Vol. 464(7290). P. 873–876. DOI: 10.1038/nature08940.

19. Boybat I., Le Gallo M., Nandakumar S.R., Moraitis T., Parnell T., Tuma T., Eleftheriou E. Neuromorphic computing with multi-memristive synapses // Nature Communications. 2018. Vol. 9(1). P. 2514. DOI: 10.1038/s41467-018-04933-y.

20. Hu M., Li H., Chen Y., Wu Q., Rose G.S., & Linderman R.W. Memristor Crossbar-Based Neuromorphic Computing System: A Case Study // IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems. 2014. Vol. 25(10). P. 1864–1878. DOI: 10.1109/tnnls.2013.2296777.

21. Xia Q. & Yang J.J. Memristive crossbar arrays for brain-inspired computing // Nature Materials. 2019. Vol. 18. P. 309–323. DOI: 10.1038/s41563-019-0291-x.

22. Merrikh-Bayat F., Prezioso M., Chakrabarti B., Kataeva I. & Strukov D. Memristor-based perceptron classifier: Increasing complexity and coping with imperfect hardware // IEEE/ACM International Conference on Computer-Aided Design (ICCAD). 2017. P. 549–554. DOI: 10.1109/ICCAD.2017.8203825.

23. Wang Z. et al. Fully memristive neural networks for pattern classification with unsupervised learning // Nature Electronics. 2018. Vol. 1(2). P. 137–145. DOI: 10.1038/s41928-018-0023-2.

24. Krestinskaya O., Choubey B. & James A.P. Memristive GAN in Analog // Scientific Reports. 2020. Vol. 10. P. 5838. DOI: 10.1038/s41598-020-62676-7.

25. Gi S., Yeo I., Chu M., Kim S., & Lee B. Fundamental issues of implementing hardware neural networks using memristor // 2015 International SoC Design Conference (ISOCC). 2015. P. 215. DOI: 10.1109/isocc.2015.7401790.

26. Chua L., Sirakoulis G., Adamatzky A. Handbook of Memristor Networks // Springer Cham. 2019. DOI: 10.1007/978-3-319-76375-0.

27. Shi L., Zheng G., Tian B., Dkhil B., & Duan C.-G. Research progress of the solutions to the sneak path issue in memristor crossbar arrays // Nanoscale Advances. 2020. Vol. 2(5). P. 1811–1827. DOI: 10.1039/d0na00100g.

28. Chakraborty I., Roy D. and Roy K. Technology Aware Training in Memristive Neuromorphic Systems for Nonideal Synaptic Crossbars // IEEE Transactions on Emerging Topics in Computational Intelligence. 2017. Vol. 2(5). P. 335–344. DOI: 10.1109/TETCI.2018.2829919.

29. Truong Ngoc S. A Parasitic Resistance-Adapted Programming Scheme for Memristor Crossbar-Based Neuromorphic Computing Systems // Materials. 2019. Vol. 12(24). P. 4097. DOI: 10.3390/ma12244097.

30. Liang J., Wong H.-S. P. Cross-Point Memory Array Without Cell Selectors–Device Characteristics and Data Storage Pattern Dependencies // IEEE Transactions on Electron Devices. 2010. Vol. 57(10). P. 2531–2538. DOI: 10.1109/ted.2010.2062187.

31. Wang Z. et al. Reinforcement learning with analogue memristor arrays // Nature Electronics. 2019. Vol. 2. P. 115–124. DOI: 10.1038/s41928-019-0221-6.

32. Yao P. et al. Fully hardware-implemented memristor convolutional neural network // Nature. 2020. Vol. 577(7792), P. 641–646. DOI: 10.1038/s41586-020-1942-4.

33. Prezioso M., Merrikh-Bayat F., Hoskins B., Adam G., Likharev K. Strukov D. Training and Operation of an Integrated Neuromorphic Network Based on Metal-Oxide Memristors // Nature. 2014. Vol. 521(7550). P. 61–64. DOI: 10.1038/nature14441.

Д.А. ГЕРГЕДАВА[1], Я.М. КАРАНДАШЕВ[1,2], И.Е. МЫСИН[3]
[1]Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы, Москва
[2]НИЦ «Курчатовский институт» – НИИСИ, Москва
[3]Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН, Пущино
pusher123toxic@gmail.com; karandashev@niisi.ras.ru; imysin@mail.ru

ГРАФ ПОСЕЩЁННЫХ ОБЛАСТЕЙ ДЛЯ ВЫБОРА ПРОМЕЖУТОЧНЫХ ЦЕЛЕЙ ПРИ НАВИГАЦИИ В СРЕДЕ С ПРЕПЯТСТВИЯМИ

Предложена гибридная модель навигации к запомненной цели в среде с препятствиями. Векторный контур задаёт направление к цели по расстояниям до ориентиров, а граф посещённых областей выбирает подцель при блокировке прямого движения. В U-образной среде графовые варианты повышают успешность с 25,0 до 95,8–100,0 %, в S-коридоре – с 25,0 до 75,0 %. Каркас графа опирается на геометрическую достижимость, поэтому реализация рассматривается как гибридная.

Ключевые слова: *навигация, клетки места, клетки цели, граф опыта, промежуточная цель, планирование пути, препятствия.*

Введение

В открытой среде навигация к запомненной цели может опираться на направление к ней. В невыпуклой среде прямой вектор способен пересекать стену, а локальный запрет столкновения не определяет сторону обхода. Поэтому агенту требуется представление достижимых переходов между областями пространства.

Базовым контуром служит модель Burgess, Recce и O'Keefe [1], связывающая ориентиры, пространственные активности и популяционный вектор к ранее встреченной цели; тета-зависимая организация активности согласуется с наблюдениями O'Keefe и Recce [2]. Задача данной работы – дополнить этот контур механизмом обхода внутренних препятствий.

У Edvardsen и соавторов [3] воспроизведение клеток места используется для назначения подцелей, у Gao [4] переходы обучаются во время исследования и участвуют в воспроизведении маршрута. Здесь топология извлекается из исследовательской траектории, кратчайший путь вычисляется на дискретном графе, а PC/SC-признаки аннотируют узлы. Поэтому работа позиционируется как гибридная вычислительная модель, а не как полно-

стью нейронный планировщик [5, 6]. Вклад состоит в формальном встраивании графа опыта, явном правиле переключения на подцель и сравнении позиционного, PC-аннотированного и гауссова представлений при одинаковом контроллере.

Постановка задачи и базовый нейронный контур

Агент движется в области 150 × 150 см с внутренними стенами. В нейронный контур координаты не подаются: входом служат расстояния от положения $\boldsymbol{x}$ до ориентиров $\boldsymbol{c_k}$. Графовый модуль, напротив, использует координаты симулятора для проверки достижимости; это ограничивает биологическую интерпретацию текущей реализации.

Для каждого ориентира задаются 15 сенсорных клеток с предпочтительными расстояниями iL, где L = 14 см. Для ориентира k расстояние обозначим d_k. В формулах (1), (2) и (4) функция $J(z)$ означает округление неотрицательного z вниз до ближайшего целого. При $|d_k - iL| \le 6L$ активность сенсорной клетки равна

$$s_{ki} = \min\left\{3, J\left(\frac{7L - |d_k - iL|}{2L}\right)\right\}. \quad (1)$$

При $|d_k - iL| > 6L$ принимается $s_{ki} = 0$. Каждая из 1000 клеток энторинального слоя (EC) получает пару сенсорных входов. В фазе φ её активность задаётся выражением

$$e_j^{(\varphi)} = m_j^{(\varphi)} J\left(\frac{s_{a_j} s_{b_j}}{2}\right). \quad (2)$$

Маска m_j зависит от фазы и задаёт три угловых окна: менее 60°, 60-120° и не менее 120° между направлением движения и направлением на центр пары ориентиров. Частота тета-цикла – 10 Гц.

Слой клеток места (place cells, PC) и второй конкурентный слой (SC) содержат по 250 элементов. SC здесь обозначает внутренний слой реализации, а не самостоятельный заявляемый нейрофизиологический тип. Для нейрона r нормированный вход равен

$$h_r = \frac{\sum_j W_{rj}\, x_j}{C(1 + M_r)} \quad (3)$$

Здесь C = 1 для PC и 0,5 для SC, а M_r – накопленное число новых входящих связей данного нейрона. В каждой конкурентной группе сохраняются четыре наибольших значения h_r с уровнями не выше 4, 3, 2 и 1. Бинарная

связь включается при активности пред- и постсинаптических элементов не менее 4, если она разрешена заранее заданной случайной маской связности.

Цель запоминается для восьми направлений: активные элементы SC связываются с соответствующим направленным каналом. Для SC-вектора $\boldsymbol{q}^{\varphi}$ и бинарного вектора связей $\boldsymbol{W_d}$ активность канала d за тета-цикл равна

$$g_d = \sum_{\varphi} J\left(\frac{25\left(\mathbf{W}_d \cdot \mathbf{q}^{(\varphi)}\right)}{1+\| \mathbf{W}_d \|_1}\right). \tag{4}$$

После нормировки на активность, полученную при обучении цели, формируется популяционный вектор и единичное направление движения

$$\mathbf{v} = \sum_{d} \frac{g_d}{n_d}\mathbf{u}_d, \qquad \hat{\mathbf{d}} = -\frac{\mathbf{v}}{\| \mathbf{v} \|}. \tag{5}$$

Здесь $\boldsymbol{u_d}$ – единичные векторы восьми направлений, а n_d – нормировочные коэффициенты, полученные при обучении цели. В реализации вектор $\boldsymbol{v}$ направлен от цели к агенту, поэтому движение задаётся противоположным единичным направлением. Если норма вектора меньше 10^{-6}, сохраняется прежнее направление. За один тета-цикл агент проходит 6 см; локальный контроллер при необходимости выбирает допустимое отклонение, не пересекающее стену.

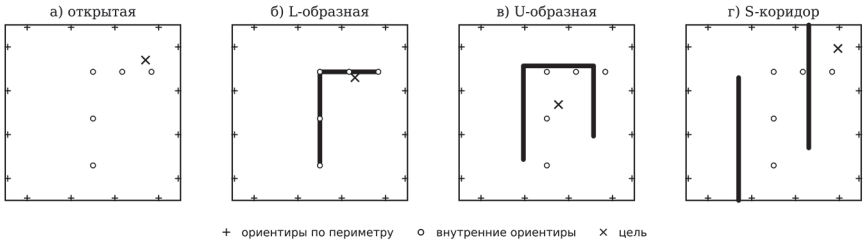


Рис. 1. Экспериментальные среды и цели: «+» – ориентиры по периметру, «○» – внутренние ориентиры, «×» – цель

Граф посещённых областей и выбор промежуточной цели

Перед навигацией агент 60 с (600 тета-циклов) исследует среду случайным блужданием; сохраняются положение и направление. После исследования для записанных состояний при построении графа заново вычисляются PC/SC-признаки либо независимый гауссов код. Следующий шаг сна-

чала ищется в диапазоне ±30°; после 25 неудачных попыток диапазон расширяется до ±90° и ±180°. При полной блокировке агент переносится в случайную допустимую точку - это инженерный механизм покрытия среды. Во всех аренах используются 16 ориентиров по периметру и пять фиксированных внутренних ориентиров; они служат входом нейронного контура и не задают рёбра графа.

Граф $G = (V, E)$ строится по последовательности наблюдавшихся положений. Узел хранит среднюю позицию $\boldsymbol{p}_i$, средний признак и число объединённых наблюдений. Новое наблюдение может быть объединено с существующим узлом, если расстояние не превышает 8 см и между положениями есть свободный от стены прямой переход. Для PC-графа дополнительно требуется косинусное сходство не ниже 0,35, для гауссова базиса - не ниже 0,60. В позиционном варианте признаком служат координаты, и дополнительный порог сходства не применяется.

Ребро добавляется между узлами последовательных положений исследовательской траектории при геометрически допустимом переходе. Повторные наблюдения перехода уменьшают его стоимость:

$$w_{ij} = \frac{\| \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j \|}{\sqrt{N_{ij}}} \left(1 + \frac{8}{\max(4, c_{ij})} \right). \tag{6}$$

Здесь c_{ij} – расстояние от середины ребра до ближайшей стены, а N_{ij} – число подтверждений перехода. Оба множителя являются инженерными эвристиками. Текущая позиция и цель подключаются к видимым узлам: после двух найденных соединений поиск прекращается за пределами 34 см, число соединений ограничено восемью. Если видимого узла нет, используется ближайший узел с удвоенной евклидовой стоимостью.

Кратчайший путь определяется алгоритмом Дейкстры [7], следующая вершина пути становится подцелью. Дейкстра используется как вычислительный суррогат распространения стоимости, а не как буквальная модель мозга; граф содержит только переходы, представленные исследовательской траекторией.

Надёжность прямого вектора оценивается по относительной норме популяционного сигнала

$$R = \frac{\| \mathbf{v} \|}{\sum_d g_d + \varepsilon}, \qquad \varepsilon = 10^{-9}. \tag{7}$$

Для сравнения трёх представлений графа используется одинаковый гибридный контроллер. Прямое нейронное направление применяется только при прямой видимости цели, $R \geq 0{,}18$, допустимом следующем шаге и менее чем четырёх циклах без достаточного прогресса. Прогрессом считается

уменьшение расстояния до текущей цели не менее чем на 0,6 см. Подцель удерживается минимум 8 циклов; после 16 циклов без улучшения выполняется принудительное перепланирование. Радиусы достижения подцели и конечной цели равны 13 и 10 см.

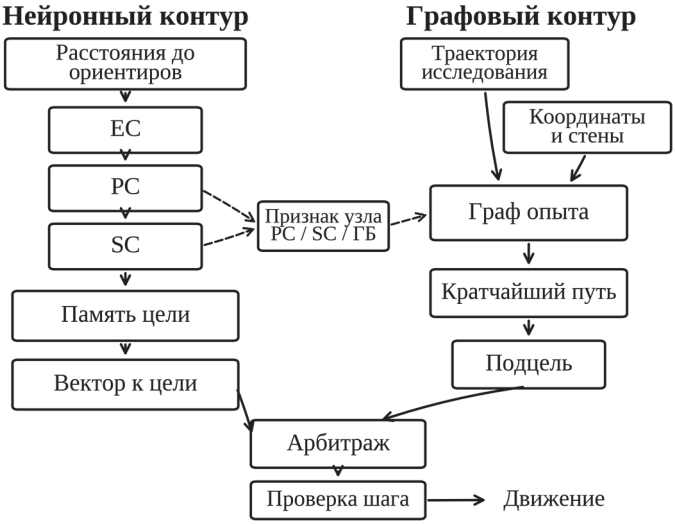


Рис. 2. Схема гибридной модели. ГБ – независимый гауссов базис пространственных признаков

Методика экспериментов

Проверялись открытая, L-образная и U-образная среды, а также S-коридор (рис. 1). Для каждой среды выполнялись три инициализации сети с разными начальными значениями генератора случайных чисел и восемь фиксированных стартовых положений, всего 24 эпизода на метод и среду. Начальное направление движения в каждом эпизоде выбиралось случайно. Максимальная длительность навигации – 28 с (280 тета-циклов); эпизод считался успешным при расстоянии до цели не более 10 см.

Сравнивались прямой нейронный вектор, локальная проверка шага и три графовых представления при одном гибридном контроллере. Позиционный вариант объединяет узлы по близости и достижимости; PC-вариант дополнительно использует активность клеток места; независимый гауссов

базис имеет центры через 15 см и стандартное отклонение 15 см и не является обученным слоем клеток места.

Таблица 1

Основные параметры вычислительного эксперимента

Параметр	Значение
Арена и движение	150 × 150 см; 60 см/с; шаг 6 см
Тета-цикл	10 Гц; три фазы
Исследование / навигация	60 с / не более 28 с; 600 / 280 циклов
Ориентиры и слои	21 ориентир; 1000 EC; 250 PC; 250 SC
Граф и пороги	слияние 8 см; подключение 34 см; PC 0,35; ГБ 0,60
Повторы	3 инициализации × 8 стартов = 24 эпизода

Основные показатели – SR и SPL [8]. Для SR рассчитаны 95 %-ные интервалы Уилсона (рис. 3). Восемь стартов одной инициализации используют общие сеть и граф, поэтому интервалы являются описательной оценкой по 24 эпизодам, а не межинициализационной статистикой. Для SPL приводится среднее по 24 эпизодам. SPL определяется как

$$\mathrm{SPL} = S\frac{L_0}{\max(L_0, L)}. \qquad (8)$$

Здесь S – индикатор успеха, L_0 – длина кратчайшего пути по графу видимости полной геометрии, а L – фактическая длина траектории. Величина L_0 используется только как эталон для оценки SPL и предполагает полное знание стен. Дополнительно регистрировались длина пути, число переключений подцелей и принудительных перепланирований.

Расчёты выполнены на Python с NumPy, pandas и Matplotlib. Совместимость с RatInABox [9] предусмотрена, однако итоговый прогон использует собственную геометрию и гауссов базис. Начальные значения генератора случайных чисел фиксированы. Код, requirements.txt и результаты: https://github.com/senatole/hippocampal-navigation-graph-subgoals.

Результаты

В открытой среде локальный и все графовые режимы дали 24/24 успеха. В L-образной среде локальный и позиционный варианты дали 22/24, PC- и гауссов графы – по 23/24: в простой геометрии локальной коррекции часто достаточно.

Таблица 2

Основные результаты; для SR указаны число успехов из 24 и доля успешных эпизодов

Среда, показатель	Базовый	Локальный	Позиционный граф	PC-граф	Гауссов граф
Открытая - SR	10/24 (0,417)	24/24 (1,000)	24/24 (1,000)	24/24 (1,000)	24/24 (1,000)
Открытая - SPL	0,324	0,995	1,000	1,000	1,000
L-образная - SR	4/24 (0,167)	22/24 (0,917)	22/24 (0,917)	23/24 (0,958)	23/24 (0,958)
L-образная - SPL	0,137	0,858	0,745	0,810	0,785
U-образная - SR	5/24 (0,208)	6/24 (0,250)	23/24 (0,958)	23/24 (0,958)	24/24 (1,000)
U-образная - SPL	0,155	0,250	0,760	0,732	0,781
S-коридор - SR	1/24 (0,042)	6/24 (0,250)	17/24 (0,708)	18/24 (0,750)	18/24 (0,750)
S-коридор - SPL	0,035	0,249	0,532	0,570	0,550

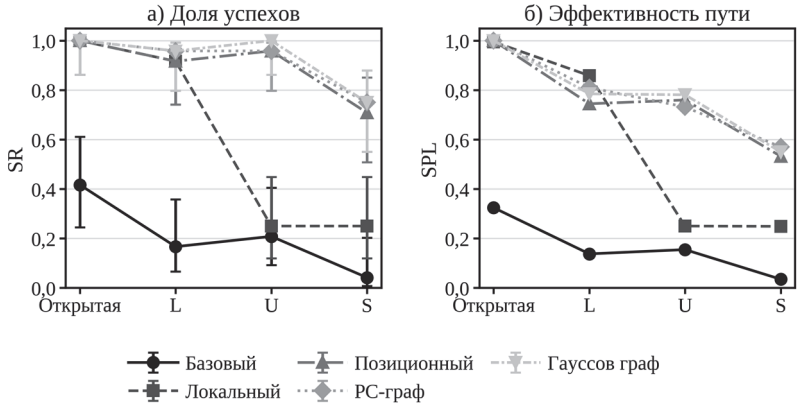


Рис. 3. Доля успешных эпизодов с 95 %-ными интервалами Уилсона и среднее SPL. Три графовых представления сравниваются при одинаковом гибридном контроллере

В U-образной среде локальный контроллер дал 6/24 (SR = 0,250; 95 %-ный ДИ 0,120–0,449), позиционный и PC-графы – по 23/24 (0,958; 95 %-ный ДИ 0,798–0,993), гауссов граф – 24/24. В S-коридоре получено соответственно 6/24, 17/24 и по 18/24 для PC- и гауссова графов. Средняя длина пути локального контроллера в U- и S-средах превышала 1270 см; для трёх графов она составила 207–271 и 643–696 см соответственно.

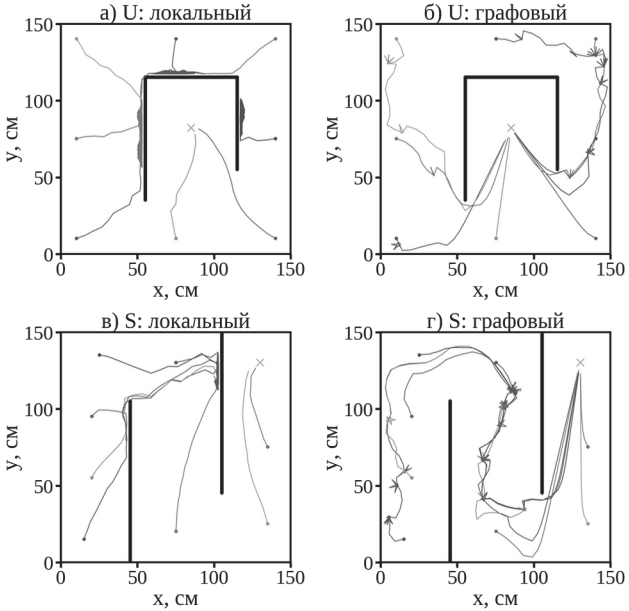


Рис. 4. Примеры траекторий локального и графового управления в U-образной среде и S-коридоре; пространственный масштаб по осям одинаков

Обсуждение

Диагностика сопоставления узлов показала совпадение координатно ближайшего узла с узлом максимального косинусного сходства в 91,1–96,4 % случаев для PC, 96,4–98,2 % для гауссова базиса и 83,1–86,2 % для SC; средняя пространственная ошибка составляла около 3,5–4,4 см. Однако рабочий контур по-прежнему подключает текущую позицию и цель к графу геометрически. Поэтому это топологический граф опыта с нейронной аннотацией, а не координатно-независимый нейронный граф.

В невыпуклых средах локальная коррекция исключает столкновение, но не кодирует необходимость временно удалиться от цели. Граф добавляет

представление достижимых переходов. По назначению подход близок к Edvardsen и соавт. [3] и Gao [4], но здесь каркас извлекается из траектории и проверяется геометрически, а Дейкстра остаётся инженерным суррогатом. A* и граф видимости с полной картой получают больше информации; отдельного поведенческого сравнения с A* не проводилось, а кратчайший путь полной геометрии используется только как эталон SPL. Позиционный граф при том же контроллере отделяет эффект топологической памяти от эффекта PC-признаков.

Ограничения работы – координатная проверка достижимости и привязка текущего состояния, перенос агента при полном застревании во время исследования, эвристические веса рёбер и только три независимые инициализации. Не реализован рабочий режим выбора текущего узла исключительно по PC/SC без координат. Следующий этап - нейронное распознавание состояния и проверка перестройки маршрута при изменении доступных проходов.

Заключение

Биологически мотивированный векторный контур дополнен топологической памятью посещённых областей, выбирающей подцель при блокировке прямого движения или отсутствии прогресса.

Графовый слой не ухудшил открытую навигацию и дал наибольший выигрыш в U-образной среде и S-коридоре. Сходные результаты позиционного, PC-аннотированного и гауссова вариантов показывают прежде всего эффект топологической памяти и не дают оснований называть текущую реализацию полностью нейронным планировщиком.

Список литературы

1. Burgess N., Recce M., O'Keefe J. A model of hippocampal function // Neural Networks. 1994. Vol. 7. No. 6-7. P. 1065–1081.

2. O'Keefe J., Recce M.L. Phase relationship between hippocampal place units and the EEG theta rhythm // Hippocampus. 1993. Vol. 3. No. 3. P. 317–330.

3. Edvardsen V., Bicanski A., Burgess N. Navigating with grid and place cells in cluttered environments // Hippocampus. 2020. Vol. 30. No. 3. P. 220–232.

4. Gao Y. A computational model of learning flexible navigation in a maze by layout-conforming replay of place cells // Frontiers in Computational Neuroscience. 2023. Vol. 17. Art. 1053097.

5. Hopfield J.J. Neurodynamics of mental exploration // Proceedings of the National Academy of Sciences. 2010. Vol. 107. No. 4. P. 1648–1653.

6. Ponulak F., Hopfield J.J. Rapid, parallel path planning by propagating wavefronts of spiking neural activity // Frontiers in Computational Neuroscience. 2013. Vol. 7. Art. 98.

7. Dijkstra E.W. A note on two problems in connexion with graphs // Numerische Mathematik. 1959. Vol. 1. P. 269–271.

8. Anderson P., Chang A., Chaplot D.S. et al. On evaluation of embodied navigation agents // arXiv:1807.06757. 2018.

9. George T.M., Rastogi M., de Cothi W.J., Clopath C., Stachenfeld K.L., Barry C. RatInABox, a toolkit for modelling locomotion and neuronal activity in continuous environments // eLife. 2024. Vol. 13. e85274.

R.M. FANDRESENA, A.I. GAVRILOV
Moscow Polytechnic University
manoafa@vk.com

DUAL-STAGE COMPUTATIONAL MODELING FOR RADIOLIGAND THERAPY: EXTRAPOLATING MACRO-KINETIC AND STRUCTURAL AFFINITIES FROM PROSTATE TO BREAST CANCER RECEPTORS

Targeted radionuclide therapy has transformed prostate-cancer care through a single, well-characterised membrane marker – Prostate-Specific Membrane Antigen (PSMA) – whose distribution is routinely recorded in imaging archives. Metastatic breast cancer does not offer an equivalent single marker: tumours co-express combinations of estrogen, progesterone, HER2, GRPR and SSTR receptors whose joint pattern is difficult to interpret by inspection, so a computational diagnostic is needed both to rank candidate ligands and to choose a treatment class. This study transfers the prostate radioligand workflow to breast targets with a dual-stage machine-learning pipeline. Stage 1 is a cheminformatics regressor trained on 1,206 curated ChEMBL compounds for human estrogen receptor alpha ($ER\alpha$); it predicts molecular binding affinity (pIC_{50}) from Morgan fingerprints plus molecular weight and lipophilicity. Stage 2 is a clearance model trained on a TCIA-sized PSMA PET/CT cohort ($N = 378$) that maps age, body weight and lesion burden onto a systemic tracer-distribution index, which is then applied in silico to breast-cancer vignettes. Random Forest remains the operational Stage 1 model ($R^2 = 0.7374$ on a held-out test set). The same split is used to benchmark a multilayer perceptron and a Fourier Kolmogorov–Arnold network, to ablate each descriptor family, and to compare quality and runtime against published $ER\alpha$ QSAR methods. The resulting two-axis score – predicted affinity versus predicted retention – provides a practical prior for radioligand selection before first-in-human dosing.

Keywords: *Radioligand Therapy, ChEMBL, TCIA, Estrogen Receptor, Machine Learning, Random Forest, Gradient Boosting, Multilayer Perceptron, Kolmogorov–Arnold Network, Ablation, Theranostics, Breast Cancer.*

1. Introduction

Targeted radionuclide therapy operates as a specialized molecular payload system, utilizing high-affinity chelator-linker-vector compounds to bring destructive ionizing particles directly to malignant cells [1], [2]. While standard therapies target localized primary masses, advanced stages demand systemic efficacy due to metastatic spread. In prostate cancer oncology, tracking ^{68}Ga- or ^{177}Lu-bound PSMA vectors has yielded remarkable clinical results, including registration-grade evidence for ^{177}Lu-PSMA-617 [3], [4], [5] and growing real-world experience beyond trial inclusion criteria [6], [7].

The prostate setting is computationally convenient for a structural reason: PSMA is effectively a *single* extracellular marker whose presence, intensity and anatomical distribution are captured by standardised PET/CT protocols and deposited in public archives [8], [9], [10]. Machine diagnostics can therefore be trained on one well-defined signal.

Conversely, advanced metastatic breast cancer lacks a singular uniform surface marker. Patients present with heterogeneous combinations of Estrogen Receptors (ER), Progesterone Receptors (PR), Human Epidermal Growth Factor Receptor 2 (HER2), and G-protein coupled configurations such as Gastrin-Releasing Peptide Receptor (GRPR) and Somatostatin Receptors (SSTR) [11], [12], [13], [14], [15], [16], [17]. Receptor profiles may differ between primary and metastatic sites[18], so the same image that is unambiguous in prostate disease becomes a mixture of competing binding sites in breast disease. Transitioning therapeutic insights derived from prostate clinical sets directly to breast cancer targets therefore faces both a structural biological wall and a data asymmetry: prostate programmes benefit from harmonised PSMA imaging and dosimetry conventions[8], whereas breast radionuclide applications remain largely exploratory [19], [20], [21], [22]. Machine diagnostics is particularly relevant here because the receptor mixture is difficult to interpret explicitly, yet the *systemic* physics of tracer clearance (blood-pool, renal filtration, tumour-sink competition) is at least partly organ-agnostic [23], [24], [25].

This paper outlines a two-tiered artificial intelligence pipeline to address that gap. Rather than isolating biochemistry from macroscopic clinical tracking, our architecture forms a computational bridge aligned with broader calls to integrate machine learning into oncology workflows [26], [27], [28], [29]. Stage 1 filters candidate ligands by predicted $ER\alpha$ binding; Stage 2 predicts systemic human

clearing behaviours from demographic and lesion-burden covariates extracted from a PSMA-labelled prostate imaging registry[9], explicitly treating clearance physics as partially transferable across tumour types when receptor biology differs [23], [24], [25], [30]. The result is a low-risk, cross-organ predictive framework intended to accelerate breast radioligand development before first-in-human dosing.

1.1. Relation to companion manuscripts by the authors

The present study is the third empirical strand in a coherent dissertation research programme and should be read together with two earlier manuscripts by Fandresena, Gavrilov, and colleagues.

Manuscript I (2026). In *Lutetium-177 Theranostics Across Prostate and Breast Cancer*[30], we combined a comparative theranostic synthesis of prostate versus breast ^{177}Lu programmes with an observational machine-learning analysis of 47 breast cancer patients from the TCIA **HistologyHSI-BC-Recurrence** cohort[31]. That work argued that multi-receptor co-expression (ER, PR, HER2, GRPR, SSTR) undermines a single-target PSMA export template, and quantified how much prognostic structure already resides in conventional staging: ensemble relapse models reached test AUC up to 0.88, with modality-specific benefit prediction for hormonal therapy, chemotherapy, and radiotherapy in the AUC $\approx$ 0.75–0.80 range, and lymph node burden dominating feature importance. Crucially, Manuscript I did not model tracer pharmacokinetics or ligand binding chemistry because no harmonised breast ^{177}Lu imaging cohort was available. **The dual-stage pipeline here supplies that missing layer**: Stage 1 addresses receptor-level chemistry for $ER\alpha$, while Stage 2 imports clearance structure from the PSMA PET registry that Manuscript I cited only narratively.

Manuscript II (2025). In *From Traditional ML to Advanced Neural Networks*[32], we benchmarked 32 supervised classifiers on the Wisconsin Diagnostic Breast Cancer (WDBC) cytology dataset ($n = 569$, 30 nuclear morphometry features). Linear and margin-based models – notably logistic regression and LinearSVC – achieved the highest F1 scores (~ 0.99), outperforming many deep architectures on this well-structured tabular benchmark. Random Forest and gradient boosting families were included in that systematic comparison and behaved competitively, reinforcing the authors' preference for interpretable ensemble learners on moderate-dimensional clinical tables. **The present work applies the same methodological discipline** – held-out evaluation, scikit-learn implementations[33], and explicit reporting of error metrics rather than accuracy alone – but shifts the feature space from FNA morphometry to ChEMBL Morgan fingerprints (Stage 1) and TCIA lesion-demography fields (Stage 2). Following that

discipline, we now also report multilayer perceptron (MLP) and Kolmogorov–Arnold network (KAN) regressors on the *same* splits, rather than assuming ensemble superiority a priori.

Incremental contribution of the present manuscript. Where Manuscript I stratified *clinical trajectories* without radionuclide data and Manuscript II validated *classification methodology* on a canonical cytology benchmark, this article unifies *molecular affinity* and *macroscopic clearance* into one extrapolation chain aimed specifically at breast radioligand development. Together, the three manuscripts progress from (i) algorithm benchmarking, to (ii) translational framing plus observational breast outcomes, to (iii) prospective in silico coupling of chemistry and systemic distribution prior to trial design.

2. Method in plain language

The clinical question is: *given a metastatic breast tumour, which radioligand class is worth synthesising, and will enough of it stay in the tumour for* ^{177}Lu *to deliver a useful dose?* Prostate practice answers an analogous question with one PET scan against PSMA. Breast practice cannot, because several receptor types coexist and none is universally present.

The pipeline therefore splits the problem into two questions that a non-specialist can keep separate:

1. **Does the candidate molecule stick to the intended breast receptor?** Stage 1 looks only at chemical structure. Each molecule is written as a SMILES string, converted to a circular fingerprint (a bit vector that records which local atomic neighbourhoods are present) and two bulk properties (size and oil/water preference). A forest of decision trees learns the mapping from those numbers onto laboratory pIC_{50}. High predicted pIC_{50} means a tight binder and a plausible vector for $ER\alpha$-positive (luminal) disease; low scores are discarded before any chelation chemistry is attempted.

2. **Once injected, does the tracer linger in a patient with a given tumour burden?** Stage 2 ignores chemistry and looks only at the body as a distribution volume. From PSMA PET/CT metadata we retain age, weight and lesion count – quantities that nuclear-medicine protocols already use as proxies for distribution volume and tumour-sink competition [8]. A boosting model learns a composite Systemic Tracer Distribution Index V_d. The same mapping is then applied to three synthetic breast-cancer profiles (few, typical, or many lesions). The hypothesis, inherited from cross-organ PSMA reviews [23], [25], is that blood-pool and renal physics transfer even when the membrane target does not.

A ligand is attractive for a trial only if Stage 1 ranks it as a binder *and* Stage 2 predicts adequate retention at the lesion load expected in the target population.

That two-axis rule is the operational diagnostic: it does not replace PET dosimetry, but it tells chemists and trialists where not to spend a first-in-human slot.

3. Methodology

The pipeline is bisected into localized chemical featurization (Stage 1) and systemic demographic clearance mapping (Stage 2). Both stages were implemented in Python 3 using RDKit for cheminformatics featurization and scikit-learn for supervised learning[33], [34]. All models share one 80/20 train/test split with a fixed random seed (42) so that architecture comparisons are not confounded by different partitions. Fig. 1 summarises Stage 1 validation; Stage 2 extrapolation outputs are reported in Table 7.

3.1. Stage 1: Molecular Featurization and Receptor Affinity

3.1.1. Data acquisition and curation

Bioactivity records for human Estrogen Receptor Alpha (**CHEMBL206**) were taken from the public curated ChEMBL extract of Suvannang et al. [35], itself derived from ChEMBL [36]. That table contains 1,231 unique $ER\alpha$ inhibitors with pIC_{50} labels after removal of inequality-bounded assays, duplicate structures and salt artefacts – a protocol designed specifically so that subsequent QSAR numbers can be compared across laboratories. Each record supplied a canonical SMILES string and a potency value. We re-standardised structures with RDKit, discarded unparseable SMILES, and aggregated replicate measurements by the median after excluding compounds whose replicate pIC_{50} spanned more than 1.5 log units. After this second pass, **1,206 unique molecules** remained. Using this public extract, rather than a smaller undocumented slice, makes the neural-network, ablation and literature comparisons below reproducible on the same chemical space.

3.1.2. Affinity transform and descriptors

Where raw IC_{50} (nM) was still required, values were converted to molar pIC_{50} to stabilise the regression target and align with medicinal-chemistry convention [36]:

$$pIC_{50} = -\log_{10}(IC_{50} \times 10^{-9}).$$

Molecules were represented as 1024-bit Morgan circular fingerprints (bond radius $= 2$, RDKit Morgan generator), capturing hashed sub-graph environments

relevant to ligand–receptor contact propensity. Global descriptors augmented the fingerprint vector: molecular weight (MW) and Wildman–Crippen LogP as a lipophilicity proxy governing membrane permeability–a factor emphasised in breast endocrine and peptide-vector design [13], [37]. The final design matrix therefore combined high-dimensional structural hashing with low-dimensional physicochemical scalars (1,026 columns).

3.1.3. Model specification and training protocol

The operational Stage 1 model is a Random Forest Regressor ($n_{\text{estimators}} = 100$, default scikit-learn split criteria) trained to predict continuous pIC_{50} [33]. Random forests were chosen for robustness to non-linear structure–activity relationships and partial interpretability via impurity-based feature importance in moderate-data cheminformatics settings, consistent with the ensemble-centric benchmarking philosophy established in our WDBC classification study [32]. The 1,206 compounds were partitioned into training ($n = 964$; 80 %) and held-out test ($n = 242$; 20 %) sets. Model quality was assessed using Mean Squared Error (MSE), Root MSE, Mean Absolute Error (MAE) and the coefficient of determination (R^2). No hyperparameter grid search was applied to the operational forest; the objective is a transparent baseline affinity surface for $ER\alpha$ rather than to compete with structure-based docking engines.

3.1.4. Neural and classical baselines on the same split

Review of the neural-network literature shows that both multilayer perceptrons and Kolmogorov–Arnold networks are immediately applicable to this tabular fingerprint problem [38], [39], [40]. We therefore trained, on the identical 80/20 split and the identical 1,026-column matrix:

- **Ridge** ($\alpha = 10$), as a linear control;
- **RBF support-vector regression** ($C = 10$), a strong kernel baseline for QSAR;
- **Gradient Boosting** (150 trees, learning rate 0.08, depth 3), the Stage 2 family applied to Stage 1;
- **MLP**: two hidden layers of 128 and 64 ReLU units, L_2 penalty 10^{-4}, early stopping, scikit-learn `MLPRegressor`[33];
- **Fourier-KAN**: a Kolmogorov–Arnold regressor with learnable Fourier edge activations (2 harmonics, 12 hidden units, 220 epochs), following the KAN construction of Liu et al.[38] and the Fourier univariate maps used in molecular KA-GNNs[39]. Fourier activations were preferred to B-splines because the input is a 1,024-dimensional binary fingerprint for which spline grids are prohibitively wide.

Wall-clock training time on the same hardware is reported alongside accuracy so that quality and performance can be compared in one table.

3.1.5. Ablation protocol

To isolate which part of the representation carries the affinity signal, the Random Forest was retrained on five nested feature sets: Morgan fingerprints alone; MW and LogP alone; fingerprints+MW; fingerprints+LogP; and the full 1,026-column matrix. All ablations reuse seed 42 and the 80/20 split, so differences in R^2 are attributable to the descriptor family rather than to a new partition.

3.2. Stage 2: Macro-Imaging Translation and Systemic Clearance

3.2.1. Clinical cohort and feature engineering

Macroscopic kinetic modelling used the publicly released *PSMA-PET-CT-Lesions* registry hosted by The Cancer Imaging Archive (TCIA; table **v01_20251118.tsv**), comprising 378 patients and 597 whole-body studies with expert lesion segmentations [9], [10]. This cohort documents PSMA-avid lesion metrics from ^{68}Ga/-PSMA PET/CT workflows in metastatic prostate cancer–the clinical setting in which tracer pharmacokinetics and lesion burden are most extensively characterized [3], [8], [41]. Voxel-level reporting was collapsed to three interpretable covariates:

- Age_{Clean} – patient age at imaging (years);
- $Weight_{Clean}$ – total body weight (kg), proxy for distribution volume and renal handling;
- $Lesions_{Clean}$ – total monitored PSMA-positive lesion count, proxy for tumour sink capacity and blood-pool competition.

Missing or non-physical values were winsorised or imputed according to cohort documentation prior to modelling. The design intentionally mirrors demographic stratifiers used in PSMA theranostic trials and real-world series [4], [5], [6].

3.2.2. Target construct and learning algorithm

The regression target was a composite *Systemic Tracer Distribution Index* (V_d), constructed from normalised combinations of age, weight, and lesion burden such that higher values indicate greater apparent tracer retention or slower effective clearance under fixed injected activity–consistent with macro-dosimetry reasoning in radioligand programmes [2], [8]. A Gradient Boosting Regressor (sequential tree boosting with squared-error loss, scikit-learn implementation [33]) was fit to

predict V_d from the three baseline covariates. Boosting was selected to capture non-linear interactions between body habitus and lesion load without imposing a parametric compartmental model, which would require time–activity curves not uniformly available in the tabular TCIA release.

The same three-covariate matrix and 80/20 split were used to train Ridge, Random Forest, MLP (hidden layers 32×16) and Fourier-KAN (3 harmonics, 8 hidden units) so that Stage 2, like Stage 1, reports an architecture comparison rather than a single unchallenged booster. A leave-feature-out ablation (age only, weight only, lesions only, and every pair) quantifies how much of V_d is carried by tumour burden versus body habitus.

3.2.3. Cross-organ extrapolation design

Although Stage 2 is trained on prostate PSMA cohorts, the learned mapping is applied *in silico* to synthetic breast cancer patient profiles differing only in lesion count and demographic anchors. This reflects the manuscript hypothesis–first articulated in our ^{177}Lu theranostic synthesis [30]–that circulatory, renal, and whole-body distribution constraints are partially organ-agnostic once a ligand class is fixed, whereas receptor-specific binding is handled in Stage 1 [23], [24], [25]. The extrapolation is therefore a translational stress test, not a claim of measured breast PSMA pharmacokinetics [21], [22].

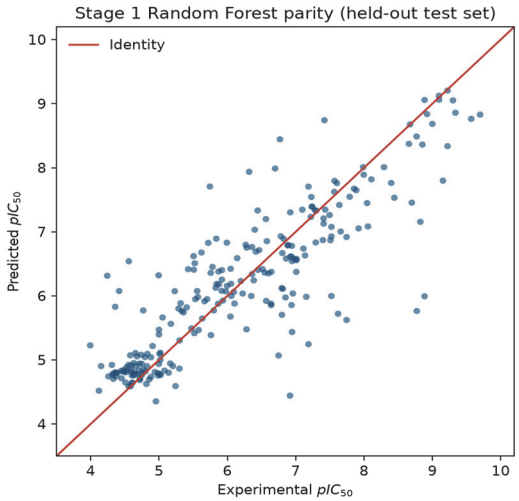


Fig. 1. Parity scatter evaluating experimental ChEMBL pIC_{50} against Stage 1 Random Forest predictions on the held-out 20% test set ($n = 242$)

4. Results

4.1. Stage 1 Performance Metrics

Following the 80/20 split on 1,206 cleaned ChEMBL compounds, the Random Forest regressor achieved a held-out test MSE of **0.5094** (RMSE $=$ $=$ 0.7137, MAE $=$ 0.4934) and $R^2 = 0.7374$. Roughly three quarters of the variance in $ER\alpha$ pIC_{50} is therefore explained by Morgan fingerprints plus MW and LogP. This band matches independent $ER\alpha$ QSAR studies on the same chemical neighbourhood, which report external R^2 or Q^2_{ext} near 0.73 with substructure descriptors[35] and test $R^2 = 0.70$–0.75 with selected two-dimensional descriptors[40], [42]. It is sufficient to rank-order ligand series for medicinal-chemistry prioritisation, but not to substitute crystallographic pose validation.

Residual error likely reflects (i) assay protocol heterogeneity across ChEMBL contributors, (ii) inactive conformers and tautomers not resolved in 2D SMILES, and (iii) fingerprint aliasing at fixed 1024-bit resolution. Nevertheless, the model recovers the correct ordering for high-affinity examples, which is the operational requirement when Stage 1 is used as a filter ahead of radioligand linker design for luminal breast phenotypes[16], [17].

Table 1 reports five high-affinity test-set predictions. Absolute errors remain below $\sim$ 0.9 log units; the largest deviations occur at the extreme of the affinity range, where regression shrinkage toward the training mean is expected. Figure 1 visualises the global parity structure; concentration of points along the identity line in the mid-affinity band supports using the model as a coarse gatekeeper before Stage 2 systemic simulation.

Table 1

Sample Stage 1 predictions: actual vs. predicted pIC_{50} (high-affinity test-set compounds)

Sample	Actual pIC_{50}	Predicted pIC_{50}
0	9.6990	8.8292
1	9.5686	8.7634
2	9.3372	8.8583
3	9.3010	9.0514
4	9.2218	9.2038

4.2. Architecture comparison, ablation, and literature baselines

Table 2 compares quality and training time for every Stage 1 architecture on the *same* split. Random Forest is the most accurate model ($R^2 = 0.7374$) and the fastest non-linear learner (1.3 s). Gradient Boosting is statistically indistinguishable ($R^2 = 0.7330$) but slower. RBF-SVR remains competitive ($R^2 = 0.7019$). Both neural architectures trail the ensembles by a wide margin: the MLP reaches $R^2 = 0.4450$ and the Fourier-KAN $R^2 = 0.1832$, while costing several times the forest's wall-clock. This ranking reproduces, on a regression QSAR task, the WDBC finding that MLPs underperform strong tabular learners when n is of order 10^3 and features are sparse fingerprints rather than dense images[32], [40]. KANs remain theoretically attractive for low-dimensional scientific functions[38], [39]; on 1,024-bit hashes they do not, in this implementation, justify replacing the forest.

Table 2

Stage 1 held-out comparison of quality and performance (identical 80/20 split, $n_{test} = 242$)

Model	MSE	MAE	R^2	Time (s)
Random Forest (operational)	**0.5094**	**0.4934**	**0.7374**	1.28
Gradient Boosting	0.5179	0.5299	0.7330	4.86
RBF-SVR	0.5782	0.5749	0.7019	0.61
MLP (128–64)	1.0767	0.7845	0.4450	5.50
Ridge	1.3525	0.8506	0.3028	0.25
Fourier-KAN	1.5845	0.8748	0.1832	11.68

Table 3 reports the descriptor ablation. Morgan fingerprints alone already achieve $R^2 = 0.7497$; adding MW or LogP does not improve–and slightly degrades–held-out fit, indicating that bulk physicochemical scalars are largely redundant once circular substructures are present. Physicochemical descriptors without fingerprints collapse to $R^2 = 0.4161$. The operational model therefore remains the full matrix for continuity with membrane-penetration reasoning, but the ablation shows that Stage 1's signal is carried by the fingerprint, not by the two scalars.

Table 3

Stage 1 Random Forest ablation of the molecular representation

Feature set	# features	MSE	R^2
Morgan fingerprints only	1024	**0.4855**	**0.7497**
Fingerprints + MW	1025	0.4981	0.7432
Full (fingerprints + MW + LogP)	1026	0.5094	0.7374
Fingerprints + LogP	1025	0.5182	0.7328
MW + LogP only	2	1.1326	0.4161

Table 4 places the operational forest against published $ER\alpha$ QSAR systems. Direct numerical equality is not expected: prior work uses PaDEL or expert-selected descriptors, different train/test cuts, and in some cases a 1,974-compound ADMET contest set rather than the 1,231-compound ChEMBL-23 extract. The relevant observation is that our Morgan-fingerprint Random Forest ($R^2 = 0.7374$, MSE $= 0.5094$) sits on the same performance plateau as the strongest published ensembles (LightGBM $R^2 = 0.7471$; stacking $R^2 = 0.7002$; substructure RF $Q^2_{\text{ext}} = 0.73$) and well above published MLPs on this target (An et al. report $R^2 = -0.60$ for **MLPRegressor**) [35], [40], [42]. We therefore do not claim a new state of the art in descriptor engineering; we claim a *reproducible, fingerprint-based* model whose accuracy is comparable to SOTA $ER\alpha$ QSAR while remaining simple enough to couple to Stage 2.

Table 4

Quality comparison with published $ER\alpha$ pIC_{50} QSAR methods. Literature numbers are taken from the cited papers and are not re-evaluated on our split

Study	Model	Descriptors	R^2	MSE
Cao and Liu (2026)[42]	LightGBM	20 DFFS 2D	0.7471	–
This work	Random Forest	Morgan+MW+LogP	0.7374	0.5094
This work	Gradient Boosting	Morgan+MW+LogP	0.7330	0.5179
Suvannang et al. (2018)[35]	RF (Q^2_{ext})	substructure counts	0.73	–
This work	RBF-SVR	Morgan+MW+LogP	0.7019	0.5782
An et al. (2022)[40]	Stacking	20 selected 2D	0.7002	0.6436
An et al. (2022)[40]	Random Forest	20 selected 2D	0.6607	0.6873
An et al. (2022)[40]	Gradient Boosting	20 selected 2D	0.5900	0.8280
This work	MLP	Morgan+MW+LogP	0.4450	1.0767
This work	Fourier-KAN	Morgan+MW+LogP	0.1832	1.5845
An et al. (2022)[40]	MLP	20 selected 2D	-0.60	3.2465

4.3. Stage 2 Real-Data Validation and Extrapolation

Table 5 reports the Stage 2 architecture comparison on the held-out 20 % of the $N = 378$ cohort. Because V_d is a composite of the three input covariates,

linear recovery is expected to be strong: Ridge attains $R^2 = 0.9514$ in 0.02 s and the MLP $R^2 = 0.9494$. Gradient Boosting ($R^2 = 0.9275$), Random Forest ($R^2 = 0.9080$) and Fourier-KAN ($R^2 = 0.9057$) remain accurate. We retain Gradient Boosting as the operational Stage 2 model because the intended use is non-linear extrapolation to lesion loads outside the training histogram, not interpolation of a constructed index; the table nonetheless shows that a linear or MLP surrogate would be statistically adequate if parsimony were the only goal.

Table 5

Stage 2 held-out comparison of quality and performance ($N = 378$, 80/20 split)

Model	MSE	MAE	R^2	Time (s)
Ridge	**2.3148**	**1.2077**	**0.9514**	**0.018**
MLP (32–16)	2.4107	1.2303	0.9494	1.125
Gradient Boosting (operational)	3.4528	1.4640	0.9275	0.235
Random Forest	4.3829	1.6532	0.9080	0.229
Fourier-KAN	4.4900	1.6423	0.9057	0.085

The leave-feature-out ablation (Table 6) is more informative than the architecture ranking. Lesion count alone yields $R^2 = 0.7836$; age or weight alone yield negative R^2. Adding weight to lesion count raises R^2 to 0.9129; adding age as well reaches 0.9275. Systemic index scores are therefore driven by tumour-sink competition, with body mass as a secondary dilution term and age as a weak residual – exactly the hierarchy assumed by PSMA macro-dosimetry guidelines [6], [8].

Table 6

Stage 2 Gradient Boosting ablation of demographic and lesion covariates

Covariate set	MSE	R^2
Lesions + weight + age (full)	**3.4528**	**0.9275**
Lesions + weight	4.1481	0.9129
Lesions + age	10.119	0.7875
Lesions only	10.306	0.7836
Weight only	52.356	−0.099
Age + weight	54.794	−0.151
Age only	62.700	−0.317

To probe cross-organ behaviour, we applied the fitted Stage 2 mapping to three synthetic breast cancer clinical vignettes that differ mainly in metastatic lesion count (2, 5, and 9 lesions). Table 7 summarises the resulting V_d projections. Early-onset metastatic burden (two lesions) yields a low index (7.39), whereas high-burden disease (nine lesions) approaches fourfold higher retention

(29.39). The near-linear scaling across the post-menopausal standard (five lesions; 17.56) and high-burden profiles confirms that the booster primarily encodes tumour-sink competition for circulating tracer – a mechanism argued to be shared across solid-malignancy contexts when renal and blood-pool kinetics dominate [23], [25], [43].

These projections must be read as *computational priors* for trial simulation, not measured breast uptake. They complement – rather than replace – the observational finding from Manuscript I that nodal and staging covariates already explain much relapse variance in a real breast cohort [28], [30]. Emerging breast PSMA and GRPR PET reports indicate heterogeneous target expression [13], [21], [41]; Stage 1 is intended to select chemistry compatible with the intended receptor class, while Stage 2 estimates whether a given lesion load and body habitus would support deliverable tumour dose under PSMA-derived clearance statistics. Future work will calibrate V_d against serial PET time–activity data in breast-specific cohorts such as those hosted in TCIA for conventional oncology trajectories [31].

Table 7

Cross-Organ Extrapolation Framework for Breast Cancer Targets

Clinical Cohort Profile	Lesion Count	Predicted Systemic Index
Early-Onset (Metastatic)	2	7.39
Standard Post-Menopausal	5	17.56
Advanced High-Burden	9	29.39

As detailed in Table 7, the model scales systemic index scores proportionally with total tumour payload burden. Interpreting these values alongside Stage 1 affinity rankings yields a two-axis decision surface: ligands with favourable pIC_{50} but projected low V_d at expected lesion loads may fail therapeutically despite strong biochemistry, whereas moderate binders in patients with high projected V_d may still achieve tumour exposure relevant to ^{177}Lu beta-range dosimetry [8], [15].

5. Discussion and Clinical Trial Constraints

By decoupling macroscopic drug clearance from localized surface antigens, Stage 2 treats the human circulatory and renal systems as an invariant fluid model conditioned on body habitus and lesion burden [8], [23]. A 20 cc breast lesion in hepatic tissue interacts with blood-pool filtration rates in an identical physical manner to an equivalent prostate mass, even though receptor biology differs [24], [25]. This is the same translational logic pursued in reviews of PSMA applications beyond prostate, in our multi-receptor breast theranostic roadmap

[30], and in emerging target reviews [12], [19]. It is also why prostate machine diagnostics can be transferred at all: the single-marker PSMA databases supply the clearance half of the problem, while the multi-receptor breast half is handled by an $ER\alpha$ (and, later, HER2/GRPR/SSTR) affinity model rather than by forcing PSMA expression onto breast tissue.

The architecture and ablation studies qualify that transfer. On Stage 1, ensembles trained on circular fingerprints match published $ER\alpha$ SOTA within a few points of R^2 and dominate MLP and KAN variants; adding MW and LogP is optional. On Stage 2, almost all predictive mass sits in lesion count. Practically, that means a trial-enrichment score can be computed from a fingerprint plus a lesion tally, without waiting for a neural architecture to be tuned.

However, translating this pipeline safely to clinical trial protocols requires addressing several physiological limits. First, while PSMA is an extracellular transmembrane enzyme, ER and PR are intracellular nuclear receptors [17]. A high Stage 1 pIC_{50} score does not guarantee therapeutic success if LogP or peptidase stability prevents membrane penetration or lysosomal retention [13], [37]. Second, receptor discordance between primary and metastatic deposits may misalign Stage 1 chemistry with true metastatic target density [18]. Third, breast PSMA expression remains controversial and subtype-dependent [20], [21], [22]; extrapolated V_d indices should be validated against breast PET time–activity curves before trial enrolment. Machine-learning literature on breast recurrence prediction underscores how strongly clinical covariates alone stratify risk [27], [28], [29] – reinforcing the need to joint-model imaging, receptor status, and clearance in any future radionuclide protocol.

Future iterations must introduce an intermediate cellular internalization rate layer to model membrane crossing before laboratory testing, replace synthetic vignettes with harmonised breast PET dosimetry cohorts [31], [41], and integrate Stage 1–2 outputs with the relapse and treatment-benefit models already reported for conventional breast care[30]. Multimodal extensions along the lines proposed in Manuscript II – combining tabular predictors with imaging CNNs [32] – could eventually fuse ChEMBL chemistry, PET kinetics, and histopathology in a single trial-enrichment score. Graph-KAN hybrids that operate on molecular graphs rather than hashed bits [39] remain a natural Stage 1 upgrade once a larger multi-receptor ChEMBL panel is assembled.

6. Conclusion

This study validates a dual-layer AI strategy that connects ChEMBL-derived chemical structure with TCIA-hosted clinical metadata[9], [33], [36], extending a three-part research arc from WDBC classifier benchmarking[32] through ^{177}Lu

translational synthesis and observational breast outcomes [30] to prospective in silico radionuclide extrapolation. Stage 1 explains approximately 74 % of $ER\alpha$ affinity variance ($R^2 = 0.7374$) across 1,206 compounds and matches published $ER\alpha$ QSAR ensembles; MLP and Fourier-KAN baselines trained on the same split do not. Descriptor ablation shows that Morgan fingerprints – not MW or LogP – carry that signal. Stage 2 maps lesion burden to systemic tracer indices learned from 378 PSMA PET patients; covariate ablation shows that lesion count dominates, and the resulting indices extrapolate monotonically to illustrative breast metastatic profiles [3], [25]. By separating binding physics from systemic clearance, the pipeline allows researchers to simulate behaviour of new breast cancer radioligands prior to expensive clinical trials, complementing established prostate theranostic evidence [1], [2] and emerging breast target reviews [11], [12]. The framework is intentionally conservative: it ranks chemistry and flags clearance risk, but does not substitute prospective dosimetry or receptor imaging required for ethical trial design [8].

References

1. Amindarolzarbi A. and Siegel E. See it, treat it: How theranostics is reshaping cancer care and nuclear medicine // Applied Radiology. 2025. Vol. 54. P. 5–11, doi: 10.37549/AR-D-25-0084.

2. Volkova M.I., Krylov A.S., Nosov D.A. and Alekseev B.Ya. 177Lu-PSMA radioligand therapy in castration-resistant prostate cancer: Literature review and clinical case series // Modern Oncology. 2025. Vol. 27. No. 4. P. 331–339, doi: 10.26442/18151434.2025.4.203504.

3. Sartor O. et al. Lutetium-177-PSMA-617 for metastatic castration-resistant prostate cancer // New England Journal of Medicine. 2021. Vol. 385. No. 12. P. 1091–1103, doi: 10.1056/NEJMoa2107322.

4. Hartrampf P.E. et al. Matched-pair analysis of [177Lu]lu-PSMA i&t and [177Lu]lu-PSMA-617 in patients with metastatic castration-resistant prostate cancer // European Journal of Nuclear Medicine and Molecular Imaging. 2022. Vol. 49. No. 9. P. 3269–3276, doi: 10.1007/s00259-022-05744-6.

5. Dai Y. et al. Efficacy and safety of 177Lu-labelled PSMA radioligand therapy: A meta-analysis // European Urology Oncology, 2024.

6. Ling S.W. et al. First real-world clinical experience with [177Lu]lu-PSMA-i&t in patients with metastatic castration-resistant prostate cancer beyond VISION and TheraP criteria // European Journal of Nuclear Medicine and Molecular Imaging. 2025. Vol. 52. No. 6. P. 2034–2040, doi: 10.1007/s00259-025-07082-9.

7. Klementieva O.E., Lyunev A.S., Petrosova K.A. and Larenkov A.A. Preclinical evaluation of the therapeutic efficacy of the radiopharmaceutical [177Lu]lu-PSMA i&t // Radiation and Risk. 2024. Vol. 33. No. 2. P. 44–56, doi: 10.21870/0131-3878-2024-33-2-44-56.

8. Kratochwil C. et al. EANM/SNMMI procedure standard for PSMA-targeted radioligand therapy // European Journal of Nuclear Medicine and Molecular Imaging. 2023.

9. PSMA-PET-CT-Lesions Clinical Dataset (v01_20251118). The Cancer Imaging Archive, 2025. Available: https://www.cancerimagingarchive.net/

10. Jeblick K. et al. A whole-body PSMA-PET/CT dataset with manually annotated tumor lesions // Scientific Data. 2024, doi: 10.7937/r7ep-3x37.

11. Vorster M., Hadebe B.P. and Sathekge M.M. Theranostics in breast cancer // Frontiers in Nuclear Medicine. 2023. Vol. 3, doi: 10.3389/fnume.2023.1236565.

12. Musket A., Davern S., Elam B.M., Musich P.R., Moorman J.P. and Jiang Y. The application of radionuclide therapy for breast cancer // Frontiers in Nuclear Medicine. 2024. Vol. 3, doi: 10.3389/fnume.2023.1323514.

13. D'Onofrio A., Engelbrecht S., Lappchen T., Rominger A. and Gourni E. GRPR-targeting radiotheranostics for breast cancer management // Frontiers in Medicine. 2023. Vol. 10, doi: 10.3389/fmed.2023.1250799.

14. Morgat C. et al. Expression of gastrin-releasing peptide receptor in breast cancer and its relevance as a target for GRPR-directed imaging and therapy // Frontiers in Medicine. 2017.

15. Karlsson J. et al. Efficacy of a HER2-targeted thorium-227 conjugate in a HER2-positive breast cancer bone metastasis model // Cancers. 2023. Vol. 15. No. 13. P. 3419, doi: 10.3390/cancers15133419.

16. Molchanov O.E., Maistrenko D.N. and Stantsevsky A.A. Theranostics of triple-negative breast cancer: A review // Radiation Diagnostics and Therapy. 2023. Vol. 14. No. 2. P. 15–30, doi: 10.22328/2079-5343-2023-14-2-15-30.

17. Snegov A.V. and Konyanenko I.B. Contemporary management of hormone-dependent ERBB2-negative metastatic breast cancer: Overall survival outcomes // Modern Oncology. 2022. Vol. 24. No. 2. P. 226–233, doi: 10.26442/18151434.2022.2.201702.

18. Qi Y. et al. Retrospective analysis of receptor discordance between primary and metastatic breast cancer // Breast Cancer Research. 2024.

19. Balma M. et al. Theragnostics in breast cancer: A systematic review (2010–2022) // Cancers. 2023.

20. Heesch S. et al. 177Lu-labelled PSMA therapy in triple-negative breast cancer: Preclinical evidence // Nuclear Medicine and Biology. 2024.

21. Motta F. et al. Unveiling the potential of PSMA-based radiopharmaceuticals for breast cancer // Pharmaceuticals. 2025.

22. Neviere P. et al. Potential of PSMA as a theranostic target in breast cancer subtypes // Modern Pathology. 2024.

23. Li X. et al. Bridging domains: Transfer learning in biomedical data analysis – a scoping review // Artificial Intelligence in Medicine. 2024.

24. Su Y. et al. Navigating domain shift in medical image analysis // Medical Image Analysis. 2024.

25. Dondi M. et al. PSMA radioligand therapy in non-prostate cancers: A systematic review // European Journal of Nuclear Medicine and Molecular Imaging. 2024.

26. Zaridze D.G. Prospects for applying artificial intelligence to improve malignant neoplasm screening effectiveness // Public Health. 2024. Vol. 4. No. 4. P. 24–42, doi: 10.21045/2782-1676-2024-4-4-24-42.

27. Asri H., Mousannif H., Al Moatassime H. and. Noel T Using machine learning algorithms for breast cancer risk prediction and diagnosis // Procedia Computer Science. 2016. Vol. 83. P. 1064–1069.

28. Lu D., Long X., Fu W., Liu B., Zhou X. and Sun S. Predictive value of machine learning for breast cancer recurrence: A systematic review and meta-analysis // Journal of Cancer Research and Clinical Oncology. 2023. Vol. 149. No. 12. P. 10659–10674, doi: 10.1007/s00432-023-04967-w.

29. Howard F.M. et al. Integration of clinical features and deep learning on pathology for the prediction of reast cancer recurrence assays and risk of recurrence // npj Breast Cancer. 2023. Vol. 9. P. 25, doi: 10.1038/s41523-023-00530-5.

30. Fandresena M. and Gavrilov A.I. Lutetium-177 theranostics across prostate and breast cancer: Multi-receptor rationale, evidence asymmetry, and an observational machine-learning analysis of conventional breast cancer treatment outcomes // MEDICINE. SOCIOLOGY. PHILOSOPHY. Applied research. 2026. No. 5. Pp. 294–297.

31. Quintana Quintana L. et al. Recurrent breast cancer: Histopathological and hyperspectral images database (HistologyHSI-BC-Recurrence) (version 1) // The Cancer Imaging Archive. 2025. doi: 10.7937/6KPY-YT49.

32. Fandresena M., Gavrilov A.I. and Rarivonjy A. From traditional ML to advanced neural networks: A multidimensional analysis and systematic evaluation of classification models for breast cancer detection // PriMera Scientific Engineering. 2025. Vol. 7. No. 6. P. 12–19, doi: 10.56831/PSEN-07-237.

33. Pedregosa F. et al. Scikit-learn: Machine learning in Python // Journal of Machine Learning Research. 2011. Vol. 12. P. 2825–2830.

34. Landrum G. RDKit: Open-source cheminformatics // 2013. Available: https://www.rdkit.org.

35. Suvannang N. et al. Probing the origin of estrogen receptor alpha inhibition via large-scale QSAR study // RSC Advances. 2018. Vol. 8. No. 21. P. 11344–11356, doi: 10.1039/C7RA10979B.

36. Gaulton A. et al. ChEMBL: A large-scale bioactivity database for drug discovery // Nucleic Acids Research. 2012. Vol. 40. No. D1. P. D1100–D1107, doi: 10.1093/nar/gkr777.

37. Obeid S. et al. Improving GRPR-targeting radiopeptides for breast cancer theranostics // Journal of Nuclear Medicine. 2025.

38. Liu Z. et al. KAN: Kolmogorov–arnold networks // International Conference on Learning Representations (ICLR). 2025.

39. Li L., Zhang Y., Wang G. and Xia K. Kolmogorov–arnold graph neural networks for molecular property prediction // Nature Machine Intelligence. 2025. Vol. 7. P. 1346–1354, doi: 10.1038/s42256-025-01087-7.

40. An T., Chen Y., Chen Y., Ma L., Wang J. and Zhao J. A machine learning-based approach to ERalpha bioactivity and drug ADMET prediction // Frontiers in Genetics. 2022. Vol. 13. P. 1087273, doi: 10.3389/fgene.2022.1087273.

41. Parghane R. et al. Evaluation of [68Ga]-PSMA-11 PET/CT in breast cancer patients // Clinical Nuclear Medicine. 2024.

42. Cao J. and Liu Y. Multi-objective QSAR prediction of ERalpha antagonists via SHAP-based interpretation // PLoS ONE. 2026. Vol. 21. No. 1, doi: 10.1371/journal.pone.0338080.

43. Li F., Yu Y., Jiang M. and Zhang H. Targets for improving prostate tumor response to radiotherapy // European Journal of Pharmacology. 2025. Vol. 986. P. 177149, doi: 10.1016/j.ejphar.2024.177149.

Секция

Современные методы и технологии в нейробиологии

А.В. ГАЛЬТЯЕВ, О.Е. СВАРНИК
Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный
Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва
galtyaev21@gmail.com

ОЦЕНКА ПРОЦЕССОВ ОБУЧЕНИЯ МЫШЕЙ ПИТЬЕВОЙ ЗАДАЧЕ В ВИРТУАЛЬНОЙ РЕАЛЬНОСТИ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСА ПОВЕДЕНЧЕСКИХ МЕТРИК

Работа посвящена количественной оценке процессов обучения мышей питьевой задаче в виртуальной реальности. Показано, что достижение плато по числу подкреплений не соответствует полной стабилизации поведения. Обучение в виртуальной реальности целесообразно рассматривать как многопараметрическую перестройку поведения, включающую не только успешность получения подкреплений, но и изменение пространственной организации и направленности движения.

Ключевые слова: *обучение, поведенческие метрики, мыши, виртуальная реальность.*

Введение

Количественный анализ поведения животных является важным инструментом для изучения когнитивных процессов. При исследовании обучения обычно используются показатели успешности научения: число полученных подкреплений, скорость их получения, пройденное расстояние, частота правильных действий и подобные. Статистически значимые изменения таких параметров между сессиями часто рассматриваются как критерии приобретения навыка [1]. Однако подобные показатели не являются специфичными исключительно для процессов научения. Их изменение может отражать не только формирование нового поведения, но и привыкание к экспериментальной установке, снижение стресса, увеличение общей двигательной активности, моторную адаптацию или изменение стратегии выполнения задачи. Поэтому оценка обучения только по числу подкреплений

или сходным метрикам не всегда позволяет отличить собственно приобретение навыка от других поведенческих изменений [2, 3].

Одним из способов формализации процессов обучения является анализ кривых научения и выявление момента выхода поведенческих показателей на плато [4]. Однако достижение плато по отдельному параметру не означает полной стабилизации поведения: при неизменном числе подкреплений могут продолжать изменяться пространственная организация траекторий, направленность движения, вариативность поведения и взаимосвязи между поведенческими метриками. Становятся актуальными методы, позволяющие анализировать пространственно-временную структуру поведения, его хаотичность, сложность, индивидуальные особенности животных и скрытые закономерности поведения [5, 6].

Особенно актуальна такая задача при использовании систем виртуальной реальности (ВР) для изучения поведения и нейробиологических механизмов обучения у грызунов. Использование систем ВР позволяет регистрировать нейронную активность головного мозга животного in vivo во время обучения [7, 8], однако общепринятый набор критериев для оценки обучения животных в таких условиях пока не сформирован. Необходим подход, объединяющий традиционные показатели успешности обучения, динамику обучения и характеристики пространственной организации поведения.

В связи с этим целью работы является применение многопараметрического подхода к оценке обучения мышей питьевой задаче в ВР на основе комплекса поведенческих метрик и анализа пространственно-временной структуры поведения.

Конфигурация поведенческого эксперимента

Поведенческие данные были получены при обучении самцов мышей линии C57Bl/6 питьевой задаче в ВР плоской конфигурации [9]. Экспериментальная система включала систему трекинга движений Neurotar Mobile HomeCage, совмещённую с системой виртуальной реальности Phenosys. Виртуальная среда представляла собой квадратное открытое поле с различными визуальными паттернами, изображенными на стенах комнаты. Животные фиксировались посредством предварительно установленной на их череп металлическую пластины и помещались на круглую подвижную арену. Перемещая арену конечностями, мыши изменяли своё положение в виртуальном пространстве, отображаемом на мониторах Phenosys TFT. При достижении зоны, соответствующей подкрепляемому паттерну, мышь получала порцию положительного подкрепления. Для поддержания мотивации животные находились на питьевой депривации.

В анализ включены поведенческие данные 14 самцов мышей линии C57Bl/6 в возрасте 2-3 месяцев. Экспериментальная серия включала 16 экспериментальных сессий длительностью 15 минут каждая с двумя однодневными перерывами. В течение первой фазы эксперимента, соответствующей первым восьми дням обучения, все животные обучались питьевому поведению в одинаковых условиях. На девятый день мыши были случайным образом разделены на две группы: «Размер» (Size, n = 7) и «Паттерн» (Pattern, n = 7). Во второй фазе эксперимента, включавшей дни 9-12, у животных группы «Размер» была увеличена площадь виртуального открытого поля, тогда как животным группы «Паттерн» предъявлялась среда с изменёнными визуальными паттернами. В третьей фазе, соответствующей дням 13–16, виртуальная среда для обеих групп была возвращена к исходной конфигурации.

Для анализа поведения в виртуальном пространстве выделяли зону подкрепления и контрольную зону. Зона подкрепления представляла собой полукруглую область, расположенную у стены с подкрепляемым визуальным паттерном; контрольная зона была симметрична ей относительно центра виртуального открытого поля.

Подходы к анализу процессов обучения

Для анализа использовались данные 224 поведенческих сессий. Каждая сессия содержала около 90 000 записей координат движения животных; первые и последние 50 координатных записей исключались из анализа ввиду технических особенностей работы системы трекинга. На основе данных координат движения были рассчитаны поведенческие параметры: общее пройденное расстояние (евклидова метрика), доля времени в движении, количество полученных подкреплений, время пребывания в зоне подкрепления и контрольной зоне, число входов в эти зоны, а также показатели эффективности получения подкрепления.

Динамика поведенческих параметров оценивалась с использованием непараметрических статистических критериев. Для описания изменения параметров в процессе обучения и определения возможных точек перехода к устойчивому выполнению задачи применялась кусочно-линейная регрессия. Взаимосвязи между показателями обучения анализировались с помощью корреляции Спирмена, простой и множественной линейной регрессии.

Виртуальное пространство разделялось на квадратные ячейки, что позволяло оценивать распределение времени пребывания животного в различных областях пространства. Рассчитаны показатели направленности дви-

жения с использованием критерия Рэлея, а также информационные характеристики траекторий: энтропия Шеннона, нормированная энтропия, дивергенция Кульбака-Лейблера и дивергенция Йенсена-Шеннона. На основе дивергенции Йенсена-Шеннона посчитан коэффициент схожести траекторий между последовательными днями обучения.

Для статистических критериев критический уровень значимости был принят равным 0,05. Обработка и визуализация данных выполнялись с использованием пользовательских скриптов, написанных на языке программирования Python 3.13.14.

Динамика конвенциональных показателей обучения

В первой фазе обучения у мышей наблюдались выраженные изменения конвенциональных поведенческих метрик. Значимо изменялись пройденное расстояние, число входов в зону подкрепления, эффективность получения подкрепления, а также количество полученных подкреплений (рис. 1, критерий Фридмана и критерий тенденций Пейджа). Эти изменения отражают как привыкание животных к условиям эксперимента, так и научение питьевой задаче. По результатам кусочно-линейной регрессии переход к более устойчивому выполнению задачи происходил примерно на 3–5-й день обучения. При этом выход числа подкреплений на плато на 3–4-й день не означал полной стабилизации поведения: на плато сохранялись колебания этого показателя, а другие поведенческие параметры продолжали изменяться.

При сравнении медианных данных экспериментальных фаз были выявлены различия в поведении у групп животных. У мышей группы «Размер» изменение масштаба виртуального пространства сопровождалось увеличением двигательной активности и числа входов в зону подкрепления, однако количество полученных подкреплений и время пребывания в зоне подкрепления значимо не изменялись (критерий Фридмана, критерий тенденций Пейджа). Это может указывать на то, что увеличение размера виртуального поля не нарушало сформированную стратегию поведения, животные либо быстро адаптировались к изменениям, либо не восприняли их визуально. Напротив, у мышей группы «Паттерн» изменение визуальных паттернов приводило к выраженной перестройке поведения. Несмотря на увеличение двигательной активности и числа входов в целевую зону, снижались количество полученных подкреплений и время пребывания в зоне подкрепления. Возможно, у мышей данной группы нарушилась пространственная ассоциация между паттернами виртуальной среды и расположением зоны

подкрепления. Анализ конвенциональных поведенческих показателей свидетельствует о том, что группы по-разному реагировали на изменения виртуального пространства.

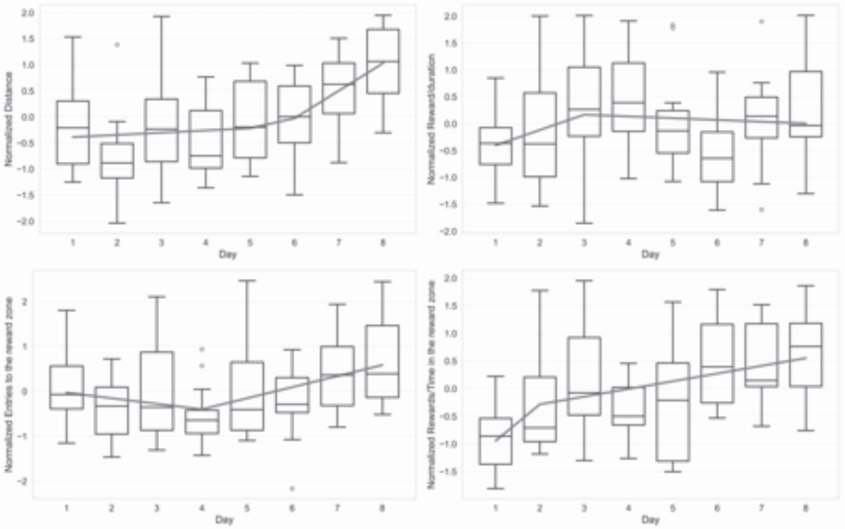


Рис. 1. Поведенческие параметры обучения мышей питьевой задаче, первые 8 дней обучения, данные для всех животных. Значения параметров стандартизованы (z-нормализация). Линия показывает результат кусочно-линейной регрессии

Пространственная организация траекторий движения мышей

Для оценки направленности траекторий движения мышей был применен критерий Рэлея (R). К концу первой экспериментальной фазы поведение животных становилось более пространственно-равномерным: значение показателя направленности снижалось с 0,236 в первый день до 0,180 на восьмой день, что может отражать привыкание мышей к экспериментальным условиям.

После изменения конфигурации виртуального пространства животные демонстрировали различную динамику поведения. У группы «Размер» направленность движения снижалась на девятый день обучения (R = 0,127), однако к концу эксперимента восстанавливалась до значений, близких к исходным (R = 0,201). Это указывает на сохранение или быстрое восста-

новление пространственной организации поведения после изменения конфигурации виртуального пространства. У мышей группы «Паттерн» изменение визуальных паттернов так же сначала сопровождалось снижением выраженности направленности движения (R = 0,083), однако затем поведение становилось резко более направленным относительно отдельных зон виртуального пространства: с 12-го дня значения R превышали 0,3, а к последнему дню достигали 0,441. Такая динамика свидетельствует о перестройке пространственного поведения и предоставляет дополнительное подтверждение тому, что у мышей этой группы нарушилась ассоциация между визуальными стимулами и местонахождением зоны подкрепления.

Дальнейший анализ пространственной организации поведения животных проведен с использованием энтропийных метрик (рис. 2). У группы «Размер» энтропийные метрики демонстрировали выход на плато уже в первые дни обучения и оставались стабильными до конца эксперимента (критерий Фридмана, критерий тенденций Пейджа). Предположительно, изменение размера виртуального пространства существенно не нарушало сложившуюся пространственную организацию поведения животных.

У группы «Паттерн» энтропийные метрики демонстрировали иную динамику: устойчивого выхода на плато не наблюдалось, а изменение визуальных паттернов сопровождалось перестройкой пространственной структуры движения. В конце второй и в третьей фазе усиливалась степень направленности поведения, что согласуется с результатами критерия Рэлея. Изменения энтропийных показателей и схожести траекторий указывали на перестройку локомоторной активности группы в целом. Изменение визуальных паттернов вызывало более выраженные изменения пространственной организации поведения, чем изменение размера виртуального пространства. Примечательно, что в первый экспериментальный день, а также в дни изменения конфигурации виртуального пространства значения информационной энтропии Шеннона и нормированной энтропии для обеих групп практически совпадали (1 день: H = 4,78 и 4,83 нат, 9 день: 4,93 и 4,94 нат, 13 день: 4,9 и 4,89 нат для групп «Размер» и «Паттерн» соответственно).

Анализ направленности движения и энтропийных характеристик позволил выявить поведенческие изменения, которые не могут быть описаны только конвенциональными показателями, такими как число полученных подкреплений, общая двигательная активность или количество входов в зоны виртуального пространства.

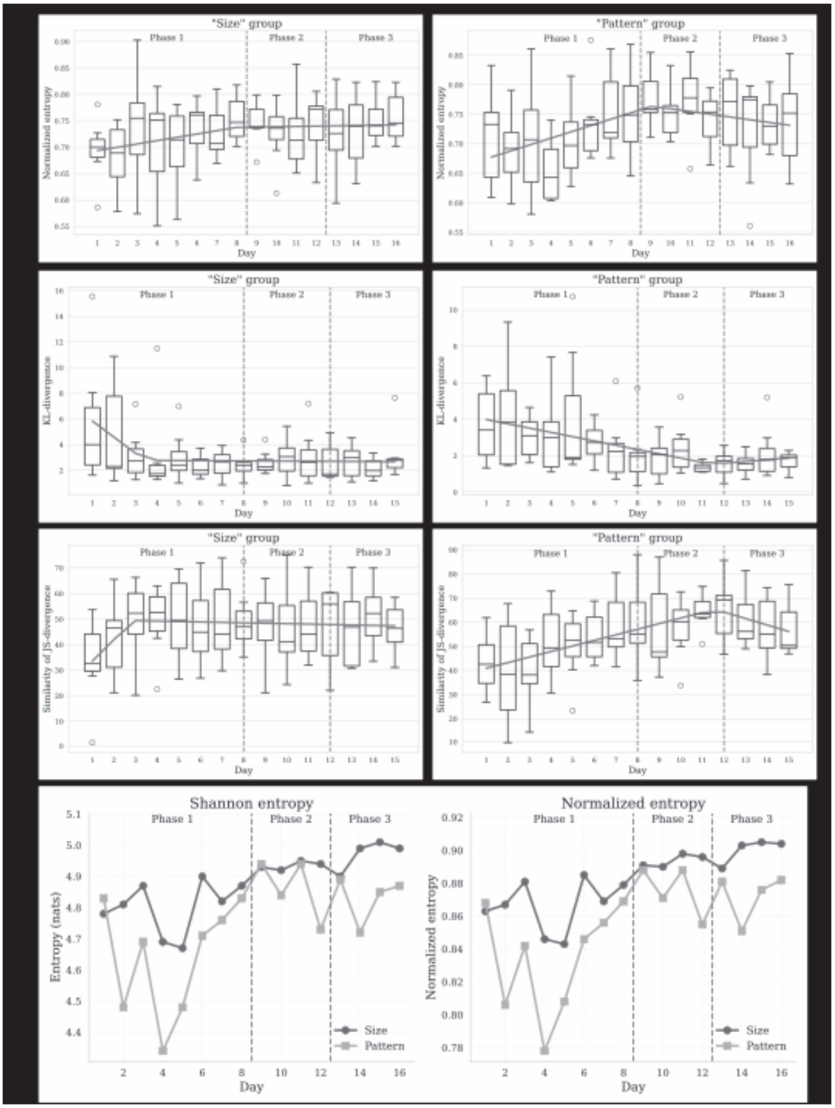


Рис. 2. Энтропийные метрики пространственной организации поведения групп мышей. a – нормированная информационная энтропия Шеннона; b – дивергенция Кульбака-Лейблера; c – коэффициент схожести траекторий движения; d – информационная энтропия Шеннона и нормированная энтропия

Взаимосвязь поведенческих метрик

Для оценки степени взаимосвязи между поведенческими параметрами и успешностью приобретения навыка был проведён корреляционный и регрессионный анализ (табл. 1). В первой экспериментальной фазе количество полученных подкреплений значимо коррелировало со всеми рассматриваемыми показателями, наиболее выраженно со временем пребывания в зоне подкрепления. Таким образом, на начальном этапе обучения успешность выполнения задачи определяется совместным вкладом локомоторной активности и пространственной организации поведения.

Во второй фазе характер связей между параметрами различался у двух групп животных. У мышей группы «Размер» количество полученных подкреплений было преимущественно связано со временем движения и нормированной энтропией, связь с числом входов в зону подкрепления была менее выраженной. У мышей группы «Паттерн» статистически значимые связи сохранялись для времени пребывания в зоне подкрепления и нормированной энтропии, а связь с общей двигательной активностью ослабевала. Это свидетельствует о различии поведенческих стратегий при изменении размера виртуального поля и визуальных ориентиров.

В третьей фазе эксперимента сильные положительные корреляции между числом подкреплений и временем пребывания в зоне подкрепления сохранялись в обеих группах. Кроме того, в обеих группах наблюдалась выраженная связь между числом подкреплений и нормированной энтропией и между числом подкреплений и временем движения. При этом число входов в зону подкрепления во второй и третьей фазах не было значимо связано с количеством подкреплений.

Таблица 1

Коэффициент корреляции Спирмена (ρ) в разных фазах эксперимента между параметром полученного подкрепления и поведенческими метриками. * - p < 0,05, ** - p < 0,01

Подкрепления--Параметр	Фаза 1	Фаза 2	Фаза 3
Время в движении	0,34**	Size: 0,55* Pattern: 0,25	Size: 0,51** Pattern: 0,51**
Время в зоне подкрепления	0,73**	Size: 0,29 Pattern: 0,49**	Size: 0,73** Pattern: 0,78**
Вхождения в зону подкрепления	0,32**	Size: 0,27 Pattern: 0,1	Size: 0,18 Pattern: 0,19
Нормализованная энтропия	0,35**	Size: 0,56** Pattern: 0,42*	Size: 0,75** Pattern: 0,73**

Множественная линейная регрессия дополнила результаты корреляционного анализа. В первой фазе модель, включавшая время пребывания в зоне подкрепления и нормированную энтропию, объясняла значительную долю вариативности числа подкреплений ($R^2 = 0,62$). Во второй фазе качество моделей снижалось в обеих группах ($R^2 = 0,34$ и $R^2 = 0,33$ для групп «Размер» и «Паттерн»), что может отражать перестройку поведения после изменения условий виртуальной среды. В третьей фазе качество регрессионных моделей возросло, особенно у группы «Размер» ($R^2 = 0,77$ и $R^2 = 0,6$ для групп «Размер» и «Паттерн»), что указывает на восстановление более устойчивой связи между успешностью выполнения задачи и структурой поведения.

Дополнительный анализ зависимости времени движения от пройденного расстояния показал различия между группами в организации локомоторной активности. При сопоставимых изменениях пройденного расстояния группы «Размер» и «Паттерн» демонстрировали разные режимы движения (t-критерий Стьюдента для коэффициентов регрессионных моделей), что может указывать на различия в исследовательской активности и стратегии выполнения задачи.

Таким образом, корреляционный и регрессионный анализ показал, что обучение в виртуальной реальности сопровождается изменением не только отдельных поведенческих показателей, но и структуры связей между ними. Это подтверждает необходимость многопараметрического подхода к оценке приобретения навыка.

Выводы

Использование только конвенциональных показателей обучения, таких как число полученных подкреплений, пройденное расстояние, время движения и число входов в целевую зону, позволяет зафиксировать изменение поведения, но не обязательно дает возможность отличить формирование навыка от привыкания, моторной адаптации или изменения исследовательской активности. Многопараметрический анализ позволяет рассматривать обучение как перестройку структуры поведения, включающую успешность получения подкреплений, двигательную активность, пространственную организацию траекторий, направленность движения и взаимосвязи между поведенческими метриками.

Кусочно-линейная регрессия позволила формализовать переход мышей к более устойчивому выполнению задачи. Достижение плато по числу полученных подкреплений не означало полной стабилизации поведения, поскольку другие поведенческие параметры продолжали изменяться.

Использование критерия Рэлея и энтропийных метрик позволило выявить различия между группами животных, которые не описывались

только числом подкреплений или общей двигательной активностью. Изменение визуальных паттернов вызывало более выраженную перестройку пространственной организации поведения, чем изменение размера виртуального пространства.

Корреляционный и регрессионный анализ показал, что успешность выполнения задачи связана не с отдельной метрикой, а со структурой взаимосвязей между параметрами поведения. Состав значимых предикторов менялся между экспериментальными фазами и группами, что указывает на различие поведенческих стратегий при изменении условий виртуального пространства.

Рассмотренный подход может быть использован для более полной количественной оценки обучения животных в виртуальной реальности и для последующего сопоставления поведенческих изменений с нейрофизиологическими данными.

Список литературы

1. Buccafusco J.J. Methods of Behavior Analysis in Neuroscience. 2nd ed. Boca Raton (FL): CRC Press/Taylor & Francis; 2009. 374 p.

2. Сварник О.Е., Булава А.И., Гладилин Д.Л., Нажесткин И.А., Кузина Е.А. Актуализация имеющегося опыта и особенности последующего научения // Экспериментальная психология. 2020. Т. 13. № 3. С. 118–131.

3. Ramírez-Ruiz J., Grytskyy D., Mastrogiuseppe C., Habib Y., Moreno-Bote R. Complex behavior from intrinsic motivation to occupy future action state path space. Nature Communications. 2024. Vol. 15. No. 1. P. 6368.

4. Smith A.C., Frank L.M., Wirth S., Yanike M., Hu D., Kubota Y., Graybiel A.M., Suzuki W.A., Brown E.N. Dynamic analysis of learning in behavioral experiments. The Journal of Neuroscience. 2004. Vol. 24. No. 2. P. 447–61.

5. León A., Hernández V., Huerta U., Hernández-Linares C.A., Toledo P., Avendaño Garrido M.L., Escamilla Navarro E., Guzmán I. Ecological Location of a Water Source and Spatial Dynamics of Behavior Under Temporally Scheduled Water Deliveries in a Modified Open-Field System: An Integrative Approach. Frontiers in Psychology. 2020. Vol. 11. P. 577903.

6. Maei H.R., Zaslavsky K., Wang A.H., Yiu A.P., Teixeira C.M., Josselyn S.A., Frankland P.W. Development and validation of a sensitive entropy-based measure for the water maze. Frontiers in Integrative Neuroscience. 2009. Vol. 3. P. 33.

7. Thurley K., Ayaz A. Virtual reality systems for rodents. Current Zoology. 2017. Vol. 63. No. 1. P. 109–119.

8. Pettit N.L., Yap E.L., Greenberg M.E., Harvey C.D. Fos ensembles encode and shape stable spatial maps in the hippocampus. Nature. 2022. Vol. 609. No. 7926. P. 327–334.

9. Гальтяев А.В. Сварник О.Е. Применение технологий виртуальной реальности для изучения когнитивных процессов на примере обучения и памяти у мышей линии C57Bl/6 // Труды 67-й Всероссийской научной конференции МФТИ «Нано-, био-, информационные, когнитивные и социогуманитарные науки и технологии». Москва, Физматкнига, 2025. С. 24–27.

Д.Р. ГРАЧЕВ[2], Л.В. ВИНОГРАДОВА[3], Е.М. СУЛЕЙМАНОВА[3], И.В. СЫСОЕВ[2,1]

[1]Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского

[2]Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

[3]Институт высшей нервной деятельности и нейрофизиологии РАН, Москва

grachevr1@gmail.com

РАЗЛИЧЕНИЕ ДЕЛЬТА- И ТЕТА-РИТМОВ СИГНАЛОВ ЛОКАЛЬНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ МОЗГА ЖИВОТНЫХ*

В данной работе рассматривается проблема классификации различных ритмов активности головного мозга. Полагается, что с помощью мер нелинейной физики представляется возможным по сигналам записей электроэнцефалографии отличать тот или иной ритм активности головного мозга крыс. В качестве инвариантной меры выбирается корреляционная размерность. Задачей работы является оценка корреляционной размерности записей сигналов внутричерепной электроэнцефалографии дельта- и тета-ритмов в разных отделах головного мозга крыс и сравнение результатов оценок. Результаты работы представляют собой средние значения корреляционной размерности и планки погрешностей для каждого из отведений, усредненные по всем особям крыс.

Ключевые слова: *корреляционная размерность, временной ряд, восстановление вектора состояния.*

Введение

Из-за увеличивающейся из года в год продолжительности жизни у людей увеличиваются и случаи заболеваний возрастными нейроденегеративными патологиями головного мозга [1]. Диагностика и лечение таких заболеваний становятся всё актуальнее.

Для проблемы диагностики нейродегенеративных заболеваний важным является вопрос о различении ритмов активности головного мозга. В зависимости от интенсивности работы мозга выделяют различные ритмы активности электрических колебаний между нейронами: от глубокого сна до активного бодрствования, и соответственно, от дельта- до гамма-ритма [2].

* Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 25-12-00176.

Важность различения ритмов электрической активности мозга для диагностики следует из того, что наблюдения ритмов, не соответствующих когнитивной активности, свидетельствуют о патологиях в работе мозга.

В целях диагностики применяют различные методы. Чаще всего используется спектральный анализ сигналов электроэнцефалографии, однако его применимость ограничена из-за различных факторов, например, перекрытия частот, суперпозиции ритмов, индивидуальных особенностей мозга и других. Реже в качестве метрик используют инвариантные меры из нелинейной динамики [3]. Они лишены этих недостатков, однако сложны в применении и требуют соблюдения многих нюансов.

Для того, чтобы охарактеризовать сложность и регулярность сигнала на практике часто применяют корреляционную размерность, рассчитывая её для скалярных временных рядов сигналов электроэнцефалограммы.

Описание алгоритма

Корреляционная размерность основывается на вероятности попадания двух точек множества в одну ячейку сетки фиксированного размера ε и формы, и подсчёте суммы всех таких вероятностей $C(\varepsilon)$. Полагают, что зависимость этой суммы от размера ячеек выглядит следующим образом:

$$\mathrm{C}(\varepsilon) \approx \varepsilon^{D_2}\ , \tag{1}$$

где D_2 – это корреляционная размерность.

Тогда, прологарифмировав обе части и выразив D_2 и устремив ε к нулю, получим:

$$D_2 = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{log C(\varepsilon)}{log \varepsilon}\ . \tag{2}$$

На практике формулой (2) не пользуются, а прибегают к методу Грассбергера-Прокаччиа [4]. Он состоит в подсчёте всех пар точек множества, расстояние между которыми не превышает заданное. Последнее обозначается как ε и варьируется в пределах от минимального расстояния между парами точек множества до диаметра (максимального расстояния между парами точек) самого множества. Для перехода от количества к вероятностям данную сумму делят на общее количество всех пар, за исключением пар с одинаковыми индексами. Результат называют корреляционным интегралом, имеющим вид:

$$\mathrm{C}_M(\varepsilon) = \lim_{M \to \infty} \frac{1}{M(M-1)} \sum_{i,j=1}^{M} \theta\left(\varepsilon - \left\|x_i - x_j\right\|\right)\ , \tag{3}$$

где $i \neq j$, M – это количество точек временного ряда, $\theta(x)$ – это ступенчатая функция Хэвисайда:

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x \geq 0. \end{cases} \quad (4)$$

Далее корреляционный интеграл наносят на график в двойном логарифмическом масштабе. На полученном графике находят наиболее длинный линейный участок, аппроксимируют его прямой методом наименьших квадратов и находят её угловой коэффициент. Значение тангенса угла наклона аппроксимирующей прямой и является оценкой корреляционной размерности множества.

При этом на выбор величины ε накладываются дополнительные условия. Если ε приближается к минимальному расстоянию между всеми парами, то пар точек, удовлетворяющих условию, становится недостаточно для статистической оценки корреляционной размерности. Если же случай противоположный, то есть ε приближается к максимальному расстоянию между всеми парами, то на оценку размерности влияют края аттрактора, где число пар точек, удовлетворяющих условию, меньше, чем на других масштабах ε.

Существует формула, связывающая максимальное значение корреляционной размерности с количеством точек, необходимым для её оценки [5]:

$$D_{max} \cong 2lgM. \quad (5)$$

Оценка корреляционной размерности не может превышать числа координат, имеющихся в распоряжении. Однако сложность самого процесса может быть выше числа переменных. Кроме того, чаще всего сигналы снимаются для единственного канала либо часть каналов относится к областям, не участвующим в патологической активности. Поэтому при оценке корреляционной размерности необходимы методы для получения многомерных (векторных) временных рядов из одномерных (скалярных) временных рядов.

Для этого используют разные методы, но чаще всего применяется метод последовательного численного дифференцирования и метод задержек [6]. Поскольку последовательное дифференцирование приводит к очень высокому росту влияния шумов, значимых в рассматриваемых записях, уже для второй производной, в данной работе далее будет использоваться метод задержек.

Метод задержек заключается в том, что из одномерной реализации $x(t)$ некоторого процесса возможно получить полную динамику системы в пространстве вложения, рассматривая реализации исходного временного ряда $x(t)$, сдвинутые на время кратное характерному времени τ, в качестве новых независимых переменных:

$$\overline{r}(x(t), x(t-\tau), .., x(t-(m-1)\tau)), \quad (6)$$

где $\overline{r}$ – восстановленный вектор состояния; m – размерность пространства вложения.

На выбор времени сдвига τ накладываются определенные ограничения и критерии. Если τ выбирается слишком малым, то восстановленные переменные оказываются практически не различимыми, восстановленный аттрактор вытягивается вдоль диагонали, что не дает никакой новой информации о динамике системы. Если же выбранное значение τ оказывается слишком большим, то переменные оказываются некоррелированными, что также не позволяет получить новой информации о динамике системы.

Для унификации и автоматизации выбора времени задержки τ используют время задержки первого пересечения нуля автокорреляционной функции [7]:

$$\psi_x(\tau) = \frac{1}{(N-\tau-1)\sigma^2} \sum_{i=\tau}^{N-1} (x_i - \mu)(x_{i-\tau} - \mu), \quad (7)$$

где $\mu = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} x_i$ – математическое ожидание; $\sigma^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=0}^{N-1} (x_i - \mu)^2$ – эмпирическая дисперсия; N – количество точек во временном ряде.

Критерии накладываются также и на размерность пространства вложения m. Существует оценка минимальной размерности пространства вложения для успешного восстановления вектора состояния:

$$m \geq 2D_1 + 1, \quad (8)$$

где D_1 – фрактальная размерность, оценкой которой снизу является корреляционная размерность D_2.

На практике обычно строят график зависимости корреляционной размерности от размерности пространства вложения, который в случае, если сигнал не является случайным, выходит на плато и перестает меняться (или меняется слабо) [8]. Значение на плато считают искомой корреляционной размерностью.

Описание данных

Анализируемые данные представляют собой внутричерепные непрерывные записи электроэнцефалограммы 9-ти здоровых особей крыс в состояниях бодрствования и сна. Данные особи принадлежат к линии Wistar, обладающей схожими чертами развития. Запись производилась с частотой дискретизации 258 Гц беспроводным нейрологгером, закреплённым на голове животного, и записывались в широко распространённом формате

«Spike2». Длина записей составляла около 26 ч. Информационные каналы записи соответствовали двум отведениям в гиппокампе: левому (HpL) и правому (HpR), а также двум отведениям во фронтальной коре: левому (FCL) и правому (FCR). Для обнаружения эпизодов дельта- и тета-активности производилась ручная разметка сигналов локальных потенциалов.

На один ритм активности одной крысы приходилось от 3 до 17 эпизодов, длина одного эпизода варьировалась от 20 до 600 секунд. В табл. приведены данные средних длин записей и количества эпизодов тета- и дельта-ритмов для каждой крысы. У записей тета-ритма 1-й особи наблюдалась нехватка точек для восстановления вектора состояния – по 2 записи для отведений FCR и FCL. То же наблюдалось для записей тета-ритма 3-й, 4-й, 7-й и 8-й особей – по 1 записи 3-й особи для отведений FCR и FCL, 1 запись 4-й особи для отведения FCR, 1 запись 7-й особи для отведения FCL и 1 запись 8-й особи для отведения FCL.

Таблица

Среднее время эпизодов и их количество для каждой особи

Ритм	*№ особи*	*1*	*2*	*3*	*4*	*5*	*6*	*7*	*8*	*9*
Тета-ритм	ср. время, с	128	258	107	102	113	130	73	74	65
	число эпизодов	16	6	10	17	12	8	4	14	17
Дельта- ритм	ср. время, с	290	221	203	135	195	363	389	585	308
	число эпизодов	7	6	3	4	5	5	7	3	6

Результаты

Корреляционная размерность оценивалась для каждого рассматриваемого эпизода у каждого исследуемого животного. Затем все оценки, полученные по всем эпизодам от всех животных для выбранного типа активности и выбранного канала, рассматривались как выборка и по ним рассчитывались эмпирическое среднее и эмпирическая дисперсия. На рис. 1 изображены усредненные по всем особям крыс значения оценки корреляционной размерности, точки соответствуют средним значениям, а «усы» (планки погрешностей) – стандартным отклонениям. Результаты оценки указывают, что дельта-ритм имеет более высокую среднюю по всем животным корреляционную размерность во всех четырёх отведениях, хотя статистически результаты для ритмов отличаются незначимо. Вывод о более высокой размерности дельта-ритма хорошо согласуются с тем, что тета-ритм, как правило, имеет лучше выраженную основную частоту, чем дельта-ритм [2].

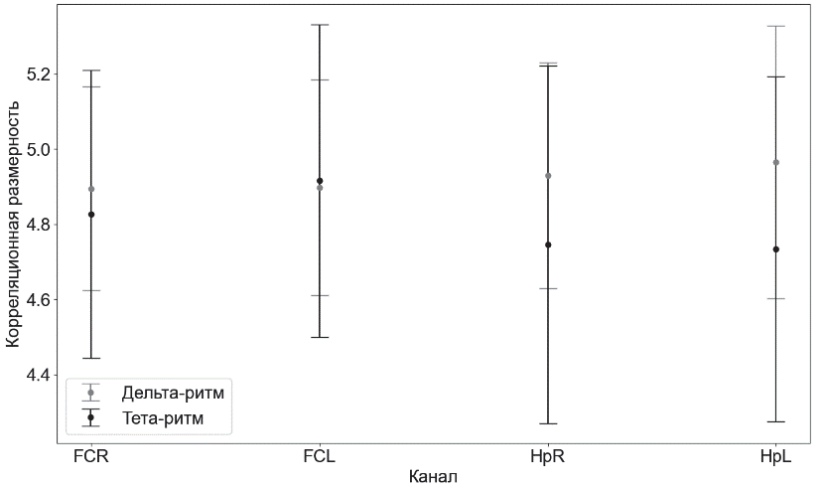


Рис. 1. Оценки корреляционной размерности для 4-х рассмотренных отведений: FC – лобная кора, Hp – гиппокамп, R – справа, L – слева. Точки соответствуют эмпирическому среднему, рассчитанному по всем эпизодам, планки погрешностей – эмпирическому среднеквадратичному отклонению

Выводы

С использованием освоенных и запрограммированных методов исследовался вопрос о возможности выявления и различения тета- и дельта-ритмов активности у здоровых крыс линии Wistar по сигналам локальных потенциалов мозга (внутричерепных энцефалограмм) из двух отведений коры и двух отведений гиппокампа. Были проведены восстановление вектора состояния методом задержек и оценка корреляционной размерности по записям 9 животных, для которых в сумме было рассмотрено 128 эпизодов. Результаты оценки корреляционной размерности ритмов усреднялись для каждого отведения по всем особям крыс. В результате проведенной работы было выявлено, что дельта-ритм имеет в среднем большую корреляционную размерность, чем тета-ритм.

Список литературы

1. Burkle A., Caselli G., Franceschi C. et al. Pathophysiology of ageing, longevity and age related diseases // Immunity & Ageing. 2007. Vol. 4. No. 1. P. 4.

2. Buzsaki G. Rhythms of the Brain // Oxford university press, 2006.

3. McMackin R., Muthuraman M., Groppa S. et al. Measuring network disruption in neurodegenerative diseases: new approaches using signal analysis // Journal of Neurology, Neurosurgery & Psychiatry. 2019. Vol. 90. No. 9. P. 1011–1020.

4. Grassberger P., Procaccia I. Characterization of Strange Attractors // Phys. Rev. Lett. 1983. Jan. Vol. 50. P. 346–349.

5. Eckmann,J.-P., Ruelle D. Fundamental limitations for estimating dimensions and Lyapunov exponents in dynamical systems // Physica D: Nonlinear Phenomena. 1992. Vol. 56. No. 2. P. 185–187.

6. Packard N.H., Crutchfield J.P., Farmer J.D., Shaw R.S. Geometry from a Time Series // Phys. Rev. Lett. 1980. Sep. Vol. 45. P. 712–716.

7. James T. Spurious dimension from correlation algorithms applied to limited time-series data // Phys. Rev. A. 1986. Sep. Vol. 34. P. 2427–2432.

8. Кузнецов С.П. Динамический хаос. Физико-математическая литература, 2001.

Секция

Теория нейронных сетей

S. WANG[1], S. LI[1], V.S. SMOLIN[2]
[1] Lomonosov Moscow State University
[2] Keldysh Institute of Applied Mathematics, Moscow
smolin@keldysh.ru

NEURAL MAPPING OF HIDDEN-LAYER ACTIVITY SPACES AND ORTHOGONALIZATION CONDITIONS IN DEEP NEURAL NETWORKS

Geometric diagnostics for hidden-layer activity spaces combine neural mapping, coverage control, and Gram-matrix indicators. A matrix-vector relation connects activity changes with weight corrections, while ReLU and normalization determine feasible orthogonalization conditions. A five-variant experiment evaluates the original KMeans-based indicators. One cluster-free differentiable realization is also evaluated alongside a baseline and weight orthogonalization, with linear CKA as a representation diagnostic. Its mean effect is favorable but seed-dependent and not statistically significant.

Keywords: *neural mapping, hidden-layer activity, Gram matrix, orthogonalization, ReLU, Batch Normalization, CKA.*

Introduction

Deep networks approximate nonlinear mappings through hidden-layer activity spaces [1], [2]. Redundant parameters may coexist with good output accuracy [3], so internal geometry and task loss answer different questions: the former describes representation use, whereas the latter measures approximation performance.

We summarize data-induced activities by mapping vectors and inspect their coverage and normalized Gram overlap. Normalization, hyperspherical representations, and orthogonal updates motivate geometric analysis [4], [5], [6], while weight orthogonality and representation dependence concern different objects [7], [8].

The contributions are a coverage-controlled neural mapping diagnostic, a matrix-vector link between desired activity change and weight correction, a corrected local direction, and activation-dependent orthogonalization conditions. A five-variant experiment studies the original KMeans indicators. Separately, one concrete first-layer cluster-free realization, Soft Anchor Representative Orthogonalization (SARO), is compared with a baseline, activity sample-Gram regularization, and weight orthogonalization; linear CKA is diagnostic only. This bounded comparison does not claim universal training improvement or replace the mapping framework.

1. Neural Mapping and Geometric Indicators

For a learning set $\mathcal{T} = \{(X_q, Y_q)\}_{q=1}^{N}$, hidden layer L produces

$$A_q^L = W_L O_q^{L-1} + b_L, \qquad O_q^L = \varphi(A_q^L).$$
$$S^L = \{O_q^L : q = 1, \dots, N\} \subset \mathbb{R}^{n_L}. \tag{1}$$

The observed cloud is summarized by

$$M^L = \{m_1^L, \dots, m_K^L\}, \qquad m_i^L \in \mathbb{R}^{n_L}. \tag{2}$$

In the experiments, these mapping vectors are KMeans centroids. For a partition $\{S_i^L\}_{i=1}^{K}$, KMeans minimizes the within-cluster squared Euclidean distortion and each representative is the arithmetic mean,

$$\min_{\{S_i^L\},\{m_i^L\}} \sum_{i=1}^{K} \sum_{q \in S_i^L} \| O_q^L - m_i^L \|_2^2.$$

$$m_i^L = \frac{1}{|S_i^L|} \sum_{q \in S_i^L} O_q^L.$$

KMeans is an operational choice because its Euclidean centroid objective matches the assigned-distance coverage measure and yields explicit representatives for Gram analysis. Alternative constructions may change Cmap, Dnorm, and Ort; no clustering-algorithm invariance is claimed. The representatives are analytical objects, not neurons: unlike self-organizing maps [9] or ReLU region counting [10], they summarize observed hidden activities rather than topology or input partitions.

Coverage precedes angular analysis. Let $c(q)$ assign each activity to its nearest representative, let $S_i^L = \{q : c(q) = i\}$ and $n_i^L = |S_i^L|$, and define

$$c(q) = \arg\min_{i=1,\dots,K} \| O_q^L - m_i^L \|_2.$$

$$r_i^L = \frac{1}{n_i^L} \sum_{q:c(q)=i} \| O_q^L - m_i^L \|_2, \qquad \bar{r}^L = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^{K} r_i^L.$$

$$C_{\text{map}}^L = \frac{\sqrt{K^{-1} \sum_{i=1}^{K} (r_i^L - \bar{r}^L)^2}}{\bar{r}^L}. \tag{3}$$

Empty representatives must be reinitialized or handled explicitly before r_i^L is computed. A smaller C_{map}^L indicates more comparable responsibility regions; a large value warns that uneven coverage weakens angular conclusions.

For valid nonzero representatives,

$$\tilde{m}_i^L = \frac{m_i^L}{\| m_i^L \|_2}, \qquad G_{ij}^L = \langle \tilde{m}_i^L, \tilde{m}_j^L \rangle.$$

$$D_{\text{norm}}^L = \frac{1}{K(K-1)} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{K} \left| G_{ij}^L \right|.$$

$$\text{Ort}^L = 1 - D_{\text{norm}}^L. \tag{4}$$

The Gram diagonal is one. Small off-diagonal magnitudes indicate near-orthogonality, whereas large magnitudes indicate similar or opposite directions. Since Dnorm lies in [0, 1], Ort is its complementary degree of orthogonality. Representatives are constructed, checked for empty clusters and coverage, normalized, and then compared through the off-diagonal Gram terms. These indicators remain diagnostic and do not replace task loss.

2. From Diagnostics to an Explicit Update

The matrix-vector view connects a desired activity direction with a possible weight correction [11]. With $A_L = W_L O_{L-1}$ and fixed preceding activity, consider

$$\Delta W_L = -\alpha \Delta_L O_{L-1}^T.$$

$$\Delta W_L O_{L-1} = -\alpha \| O_{L-1} \|_2^2 \, \Delta_L. \tag{5}$$

The direct contribution is collinear with ΔL up to sign and scale; choosing $\alpha = \beta / \|OL-1\|^2$ gives $\Delta WLOL-1 = -\beta \Delta L$. In a multilayer network, the preceding-

layer change can rotate or distort the intended direction, so the complete perturbed product must also be considered.

$$(W_L + \Delta W_L)(O_{L-1} + \Delta O_{L-1}) = W_L O_{L-1} + W_L \Delta O_{L-1}.$$
$$+\Delta W_L O_{L-1} + \Delta W_L \Delta O_{L-1}. \quad (6)$$

Neglecting the second-order product gives

$$\Delta A_L \approx W_L \Delta O_{L-1} + \Delta W_L O_{L-1}. \quad (7)$$

The preceding-layer term may rotate or distort the intended change. Writing $\Delta^L_{\text{prev}} = W_L \Delta O_{L-1}$, the corrected local direction and its outer-product update are

$$\Delta^L_C = \Delta_L - \Delta^L_{\text{prev}}, \qquad \Delta W_L = -\alpha \Delta^L_C O^T_{L-1}.$$
$$\Delta^L_C + \Delta^L_{\text{prev}} = \Delta_L. \quad (8)$$

This first-order relation is a theoretical bridge rather than a complete estimator of every preceding-layer change. A geometric component can be combined with backpropagation as follows.

$$\Delta_L = \Delta^{\text{BP}}_L + \lambda \Delta^{\text{orth}}_L. \quad (9)$$

SARO is one concrete first-layer realization of the orthogonalizing component without iterative clustering in the parameter-update loop. It selects $K = 8$ input anchors once from optimization-train data by deterministic farthest-point sampling. For minibatch preactivations A^1_q,

$$p_{qi} = \frac{\exp\left(-\| X_q - a_i \|^2_2/\tau\right)}{\sum_j \exp\left(-\| X_q - a_j \|^2_2/\tau\right)}, \qquad s_i = \sum_q p_{qi}.$$

$$m_i = \frac{\sum_q p_{qi} A^1_q}{s_i + \varepsilon}, \qquad u_i = \frac{m_i - \bar{m}}{\| m_i - \bar{m} \|_2 + \varepsilon}.$$

Only anchors with $s_i \geq 1$ are valid, and K_v is their count. For these representatives,

$$R_{\text{orth}} = \frac{1}{K_v(K_v - 1)} \sum_{i \neq j} \left(u^T_i u_j\right)^2.$$

$$g_1 = \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{task}}}{\partial W_1} + \lambda \frac{\partial R_{\text{orth}}}{\partial W_1}.$$

$$\Delta W_1 = -\eta g_1. \quad (10)$$

Responsibilities are fixed with respect to network parameters. Csoft, the coefficient of variation of soft mean assigned distances, is diagnostic only. Centered preactivations and squared overlap differ from the KMeans post-ReLU hard mapping and absolute-overlap diagnostic. Automatic differentiation supplies the combined first-layer gradient; full multilayer compensation remains future work.

Activation geometry constrains orthogonalization. ReLU outputs are nonnegative, so a zero inner product requires disjoint positive supports; overlapping coordinates cannot cancel. Batch Normalization centers and scales components as follows.

$$\hat{O}_{qi}^{L} = \frac{O_{qi}^{L} - \mu_i}{\sqrt{\sigma_i^2 + \varepsilon}}. \tag{11}$$

An optional affine transform follows [12]. Centering permits signed cancellation but does not itself solve orthogonalization or remove inactive-unit constraints [4], [13].

3. Controlled Experiments

3.1. Five-variant diagnostic study

The synthetic target uses $x_1, x_2 \sim U[-1.5,\ 1.5]$, $N_{\text{train}} = 4000$, $N_{\text{test}} = 1000$, and

$$F(x_1, x_2) = (F_1, F_2, F_3)^T.$$

$$F_1 = \sin(\pi x_1) + 0.5\cos(\pi x_2), \qquad F_2 = x_1^2 - x_2^2.$$

$$F_3 = \sin(\pi x_1 x_2) + 0.25 x_1. \tag{12}$$

All models use ReLU hidden layers and a linear output. Adam runs for 1000 epochs with batch size 128, learning rate 10^{-3}, and seeds 0, 1, 2. At epochs 0, 100, ..., 1000, KMeans maps first-layer post-ReLU activities from the fixed evaluation set and yields Cmap, Dnorm, and Ort. The frozen implementation uses the variant-specific K in Table 1 with random_state = seed, n_init = 10, and max_iter = 300.

The variants are Baseline, wider Large, narrower Small, diagnostic-only K = 15, and Large with training noise. Baseline and K = 15 share trained networks and seedwise MSE; only representative count changes. Large with noise adds Gaussian noise with standard deviation 0.05 after the first hidden ReLU during training and omits it during evaluation.

For variant v and epoch t, the underlying evaluation error is

$$e_{vq}(t) = f_{\theta_v(t)}(X_q) - Y_q.$$

$$E_v(t) = N_{\text{test}}^{-1} \sum_{q=1}^{N_{\text{test}}} \| e_{vq}(t) \|_2^2. \tag{13}$$

Fig. 1(b) shows the base-10 logarithm of the three-seed mean; final standard deviations are retained in Table 1.

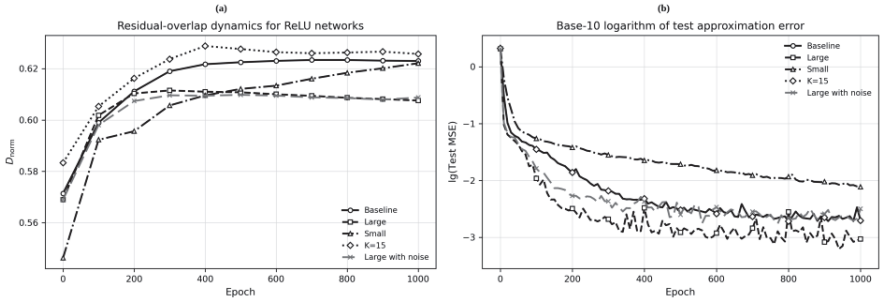


Fig. 1. Three-seed diagnostic dynamics: (a) first-layer Dnorm; (b) log10 mean evaluation MSE. Recorded checkpoints are unsmoothed

Table 1

Five-variant settings and epoch-1000 means (standard deviations). Architectures for Baseline, Large, and Small are {2, 64, 32, 16, 3}, {2, 128, 64, 32, 3}, and {2, 32, 16, 8, 3}

Variant	Setting	Test MSE	Cmap	Dnorm	Ort
Baseline	Base; K = 8	1.97(0.45)×10⁻³	0.057(0.005)	0.623(0.015)	0.377(0.015)
Large	Wide; K = 8	0.93(0.30)×10⁻³	0.063(0.004)	0.608(0.014)	0.392(0.014)
Small	Narrow; K = 5	7.70(1.26)×10⁻³	0.077(0.005)	0.622(0.024)	0.378(0.024)
K = 15	Base; K = 15	1.97(0.45)×10⁻³	0.062(0.014)	0.626(0.009)	0.374(0.009)
Large+noise	Wide; K = 8; 0.05	3.16(0.48)×10⁻³	0.059(0.006)	0.609(0.009)	0.391(0.009)

Large has the lowest MSE and Small the highest. Noise worsens Large despite similar final Dnorm, while K = 15 does not improve mean overlap. Baseline and K = 15 have identical seedwise MSE but different geometry, confirming that task error and mapping diagnostics are not interchangeable.

3.2. Explicit update evaluation

The evaluation uses Eq. (12) and architecture {2, 64, 32, 16, 3} with 3200 optimization-train, 800 validation, and 1000 fixed evaluation samples. Adam uses learning rate 10^{-3}, batch size 128, and 1000 epochs for paired seeds 0-9 with identical within-seed initialization and data order. Training and validation data fixed SARO ($\lambda = 0.03$, $\tau = 0.6330973$), CASGO ($\lambda = 0.003$), and SWO ($\lambda = 3\times10^{-6}$). KMeans is absent from parameter updates and inference. The endpoint and analysis were fixed before the single formal evaluation; the primary comparison uses an exact two-sided sign-flip test and a 100 000-resample paired bootstrap.

Fig. 2(a) shows unsmoothed validation trajectories and panel (b) the paired epoch-1000 evaluation MSEs. SARO has mean last-20 validation MSE 0.00195821 versus 0.00228082 for Baseline. CASGO is favorable on validation (0.00204930) but worse at the formal endpoint; this discrepancy is retained.

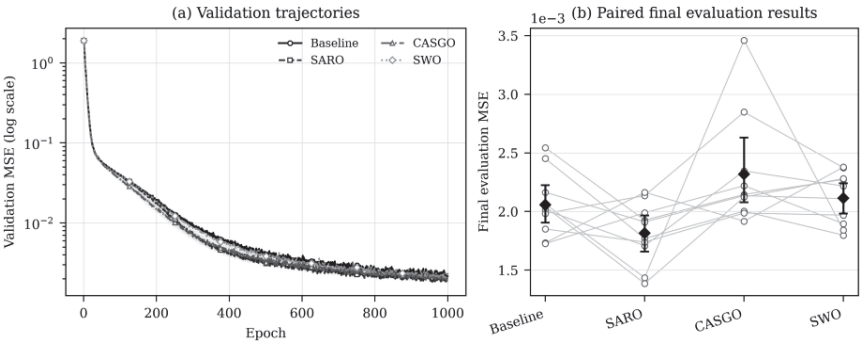


Fig. 2. Ten-seed results: a) unsmoothed validation means ± standard error;
b) paired epoch-1000 evaluation MSEs with means and bootstrap 95 % intervals

Table 2

Ten-seed evaluation performance. Differences are method minus Baseline; Runtime is training time relative to Baseline

Method	MSE mean ± std	Paired difference	Runtime
Baseline	0.00205700 ± 0.00027265	0	1.000×
SARO	0.00181646 ± 0.00026309	−0.000240545	1.517×
CASGO	0.00231837 ± 0.00047928	+0.000261370	1.601×
SWO	0.00211352 ± 0.00022228	+0.000056514	1.082×

The SARO-minus-Baseline paired mean is −0.000240544591, corresponding to a mean paired relative change of −9.97 %.

The bootstrap 95% interval is [−0.000474108838, 0.000008421569]. The exact two-sided sign-flip result is p = 0.1015625, dz = −0.5819, with wins/ties/losses 7/0/3. All runs completed without numerical failure. The favorable mean is seed-dependent, the interval crosses zero, and the primary comparison is not significant at 0.05; CASGO and SWO remain secondary comparators.

4. Direct Comparison and Computational Cost

SARO trains soft-anchor activity representatives; CASGO regularizes the centered sample Gram; SWO regularizes the dimension-appropriate first-layer weight Gram [7]; linear CKA measures aligned representation dependence; and the original KMeans mapping is a coverage/overlap diagnostic. The training comparators are

$$R_{\mathrm{CASGO}} = \frac{1}{B(B-1)} \sum_{q \neq r} \left(z_q^T z_r \right)^2.$$

$$R_{\mathrm{SWO}} = \begin{cases} \| W^T W - I \|_F^2 / n^2, & m \geq n, \\ \| W W^T - I \|_F^2 / m^2, & m < n. \end{cases}$$

Here W is an m x n weight matrix. For column-centered, sample-aligned representation matrices X and Y, linear CKA [8] is

$$\mathrm{CKA}(X, Y) = \frac{\| X^T Y \|_F^2}{\| X^T X \|_F \| Y^T Y \|_F}. \quad (14)$$

Table 3

Geometric object, role, KMeans use, and median offline cost; SARO/Csoft are timed jointly

Method	Object	Role	KMeans	Cost (s)
SARO; Csoft	Soft-anchor representatives; distance variation	Training; coverage diagnostic	No	0.0006131
CASGO	Activity sample Gram	Training	No	0.0017452
SWO	First-layer weight Gram	Training	No	0.0000319
Mapping	Clustered post-ReLU activities	Offline diagnostic	Yes	0.0268761
Linear CKA	Aligned dependence	Offline diagnostic	No	0.00012625

The 280 validation observations cover four methods, ten seeds, and seven checkpoints on the fixed 800-sample validation split. Target-alignment CKA compares first-layer preactivations or post-ReLU activities with Yval. Spearman rank correlation versus KMeans Cmap is 0.1403 for Csoft, 0.1914 for the SWO residual, -0.2646 for preactivation CKA, and -0.3706 for post-ReLU CKA. The limited and partly opposite associations support complementarity, not metric equivalence.

Costs use 100 repetitions after five warm-ups on one fixed validation representation and are separate from end-to-end training overhead. KMeans may be used at diagnostic checkpoints but not in parameter updates or inference; faster evaluation therefore does not imply semantic equivalence.

5. Discussion and Conclusion

Neural mapping remains a diagnostic framework: representatives summarize hidden activities, coverage is checked before normalized Gram overlap, and geometry does not replace task error. The five-variant study shows that network width, representative count, overlap, and MSE describe distinct aspects of behavior. The KMeans experiment characterizes the original mapping description, whereas the second experiment tests one differentiable first-layer update inspired by the same geometry.

The matrix-vector relation links a desired activity change with a possible weight correction. SARO is one cluster-free first-layer realization, not a complete multilayer algorithm. Its ten-seed mean effect is favorable but seed-dependent and not statistically significant: three seeds are unfavorable, the confidence interval crosses zero, and $p = 0.1015625$.

KMeans mapping, soft representatives, activity sample Gram, weight Gram, and linear CKA measure different objects. Avoiding clustering in parameter updates does not remove KMeans from offline diagnostics, and inference requires no KMeans. The cost comparison is therefore operational rather than a quality ranking, and alternative representative constructions may change Cmap, Dnorm, and Ort.

Evidence is limited to one synthetic target, one architecture family, one split design, ten seeds, and small activity geometry. No universal threshold, universal improvement, or metric equivalence is established. ReLU nonnegativity and Batch Normalization centering further delimit interpretation. Full multilayer compensation, additional architectures and targets, alternative mappings, and real-data validation remain future work. Practical use should preserve the distinction among representative construction, diagnostic interpretation, and parameter update.

References

1. Cybenko G. Approximation by superpositions of a sigmoidal function // Mathematics of Control, Signals and Systems. 1989. Vol. 2. P. 303–314. DOI: 10.1007/BF02551274.

2. Hornik K., Stinchcombe M., White H. Multilayer feedforward networks are universal approximators // Neural Networks. 1989. Vol. 2. No. 5. P. 359–366. DOI: 10.1016/0893-6080(89)90020-8.

3. Han S., Pool J., Tran J., Dally W. Learning both weights and connections for efficient neural networks // Advances in Neural Information Processing Systems. 2015. Vol. 28.

4. Huang L., Qin J., Zhou Y., Zhu F., Liu L., Shao L. Normalization techniques in training DNNs: Methodology, analysis and application // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 2023. Vol. 45. No. 8. P. 10173–10196. DOI: 10.1109/TPAMI.2023.3250241.

5. Loshchilov I., Hsieh C.P., Sun S., Ginsburg B. nGPT: Normalized transformer with representation learning on the hypersphere // arXiv preprint arXiv:2410.01131. 2024. DOI: 10.48550/arXiv.2410.01131.

6. Oh G., Cho W., Kim S., Choi S., Yu Y. Revisiting residual connections: Orthogonal updates for stable and efficient deep networks // arXiv preprint arXiv:2505.11881. 2025. DOI: 10.48550/arXiv.2505.11881.

7. Bansal N., Chen X., Wang Z. Can we gain more from orthogonality regularizations in training deep networks? // Advances in Neural Information Processing Systems. 2018. Vol. 31.

8. Kornblith S., Norouzi M., Lee H., Hinton G. Similarity of neural network representations revisited // Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning. Proceedings of Machine Learning Research. 2019. Vol. 97. P. 3519–3529.

9. Kohonen T. Self-Organizing Maps. 3rd ed. Springer, 2001. DOI: 10.1007/978-3-642-56927-2.

10. Montufar G.F., Pascanu R., Cho K., Bengio Y. On the number of linear regions of deep neural networks // Advances in Neural Information Processing Systems. 2014. Vol. 27.

11. Podoprosvetov A., Smolin V., Sokolov S. Vector Analysis of Deep Neural Network Training Process // Deep Learning Theory and Applications. Communications in Computer and Information Science. 2024. Vol. 2171. P. 219–237. Springer, Cham. DOI: 10.1007/978-3-031-66694-0_14.

12. Ioffe S., Szegedy C. Batch normalization: Accelerating deep network training by reducing internal covariate shift // Proceedings of the 32nd International Conference on Machine Learning. 2015. P. 448–456.

13. Cai Z., Zhu H., Shen Q., Wang X., Cao X. Batch normalization alleviates the spectral bias in coordinate networks // Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2024. P. 25160–25171. DOI: 10.1109/CVPR52733.2024.02377.

Секция

Эволюционное моделирование и многоагентные системы

YU. SKOBTSOV, V. SKOBTSOV
Saint Petersburg State University of Aerospace Instrumentation
ya_skobtsov@list.ru, vasko_vasko@mail.ru

EVOLUTIONARY PROBABILISTIC ALGORITHMS VS EVOLUTIONARY QUANTUM ALGORITHMS

Two non-traditional types of evolutionary algorithms are considered. The first one, estimation distribution algorithms (EDA), uses probabilistic models to generate a population of potential solutions. For example, it can be a probability vector for first-order algorithms. The second, quantum evolutionary algorithms, uses quantum mechanical models. These algorithms use a qubit representation. In fact, here a qubit is a minimal unit of information. Encoding of a potential solution is performed using a chain of Q-bits. These algorithms use the concept of quantum bits and superposition of states. This representation is converted to an auxiliary binary representation using a binary observation procedure. The binary representation is processed using evolutionary operators that allow us to find the best solutions. Next, we return to the quantum representation again and adjust it to reflect the best solutions found in the binary population. This is done using quantum rotation gates by «twisting» the quantum chromosome towards the best solutions found in the binary population. A comparison of probabilistic (EDA) and quantum evolutionary algorithms is presented. The similarities and differences of these algorithms are considered. The advantages and disadvantages of the new algorithms are noted.

Keywords: *evolutionary algorithms, EDA, quantum computing, evolutionary quantum algorithms.*

Introduction

Models of many biological, physical, social and other processes have formed the basis of new meta-heuristics, which have recently been actively developing in the theory and practice of artificial intelligence [1, 2]. The most striking examples are artificial neural networks, evolutionary computing, swarm intelligence, and others. The successful application of such meta-heuristics is a clear trend, especially for search and optimization algorithms. Quantum

mechanical models are currently also widely used in the theory and practice of artificial intelligence. Quantum computers were developed in the early 1980s, and currently the first systems have been implemented [3]. A new class of quantum algorithms has been proposed for such computers, which have been developed to work on future quantum computers. It has been shown that quantum algorithms can be more efficient than classical ones in solving various specialized problems [4, 5]. The interpenetration of quantum and evolutionary algorithms occurred in the 1990s. New evolutionary algorithms using quantum models have been proposed [6–8]. Despite the fact that these algorithms use quantum mechanical models as a theoretical basis, they are designed to work on traditional digital computers! Quite a lot of quantum evolutionary algorithms have been proposed, which are successfully used in solving problems of both numerical and combinatorial optimization [9, 10]. These include, for example, the tasks of the knapsack packing, designing a traveling salesman path, production scheduling , cryptanalysis, etc. [11–12]. The fusion of evolutionary and quantum computing makes it possible to use the advantages of these two different approaches and compensate for the disadvantages of each other in solving certain problems. This paper presents a comparison of probabilistic evolutionary and quantum evolutionary algorithms, which are similar in nature and methodology.

1. Traditional evolutionary algorithms

This basic type of evolutionary algorithms is based on process of the evolution simulation with natural selection. These algorithms manipulate with the set (population) of potential solutions (individuals) called chromosomes. At each step, a new generation is built by applying the genetic operators of parental selection, crossover, and mutation over several selected (promising) individuals [1, 2]. The structure of the basic evolutionary algorithm (EA) is shown in the following pseudocode.

```
    Algorithm  A1
{
    t=0
    Random initialization of the  population P(0)
    Evaluation of individuals P(0)
    While(the stop condition is not met)  do
    {
        t=t+1
        Selection of parents from the population P(t)
        Crossover
      Mutation
        Evaluation of individuals P(t)
    }
}
```

Here, a potential solution is represented by an individual chromosome and various forms of chromosome encoding are used, such as binary and symbolic strings, real vectors, trees, etc.

2. Probabilistic evolutionary algorithms

These evolutionary algorithms are currently also widely used in solving optimization problems. They are often referred to as the estimation of distribution algorithm (EDA) [1, 2, 13]. In them, the population is represented by a certain probability distribution (in the simplest case, a probability vector). The basic scheme of the probabilistic evolutionary algorithm is presented below.

Algorithm A2
{
Initialization – random generation of N individuals of a population
while (the stop condition is not met)
{
Generation of a subpopulation is the selection of M individuals from the population in accordance with fitness, where M < N
Calculating statistics for the M individuals selected above
Generation of offspring – individuals of a new population using corrected statistics
}
}

In this case, the population is represented implicitly using a certain probability distribution. In the simplest case (first-order EDA), the population is represented by a probability vector. In this case, a small subpopulation of M individuals is generated directly from the probability vector [1, 2]. Each type of EDA implements the 3 main steps of this algorithm in its own way and have to solve the following problems.

Firstly, how are M individuals selected from a total population of N possible solutions ?

Secondly, what statistics are calculated for these M individuals and how are these statistics calculated?

Third, how are statistics used to create a new population for the next generation?

It is the answers to these questions that lead to different types of EDA. The first step in the pseudocode cycle is to select M individuals from a population of N possible solutions, where $M << N$. This can be done in various ways. There is nothing special about the selection method in EDA. Selection can be performed in the same way as in any other evolutionary algorithm. The calculation of statistics is based on an estimation of the probability distribution of a population. In the simplest case, as shown below, a probability vector is used. Using a probabilistic model is a key concept of any EDA.

The following probabilistic evolutionary metaheuristics (EDA), are most widely used [1, 2]:

- one-dimensional probabilistic algorithms;
- two-dimensional dimensional probabilistic algorithms;
- multidimensional probabilistic algorithms.

The one-dimensional marginal distribution algorithm (UMDA) is the basic algorithm for EDA. This algorithm consists of a reproduction phase, a probability vector modification phase, and a new population creation phase. The following is a modification of the pseudocode of this algorithm [2], which uses binary encoding of individuals – potential solutions. It uses only first-order statistics in the form of a probability vector for population generation in each generation. Although the standard UMDA algorithm does not include elitism, it is possible to use elitism with UMDA in the same way as with any other evolutionary algorithm [1, 2]. At the same time, the elitism parameter e means that we keep the best e individuals from one generation to another. This ensures that the best individual in each generation will never be worse than the best individual of the previous generation, and ensures continuous improvement.

Algorithm A3

{
Initialization of a population of possible solutions $\{x_i\}, i \in [1, N]$
while (the stop condition is not met)
{
Selection of M individuals from $\{x_i\}$ *according to fitness, where M << N*
$Pr(x(k) = 1) \leftarrow \sum_{i=1}^{M} \delta(x_i(k) - 1)/M, for\ k \in [1, n]$
For i =1 to M (subpopulation size)
{
For i =1 to N (number of bits of the individual)
{
$r \leftarrow U[0,1]$
If $r < Pr(x(k) = 1)$
$x_i(k) \leftarrow 1$
Else
$x_i(k) \leftarrow 0$
End if
Next bit
}
Next individual
}
Next generation
}

Here $\delta(y)$ is a Kronecker delta function for which $\delta(y) = 1$ if $y = 0$, and $\delta(y)=0$ if is a random number generated from a uniform distribution between 0 and 1; $x_i(k)$ is the k -bit in the i-th individual.

3. Quantum evolutionary algorithms

The Quantum evolutionary algorithms were developed as a result of combining evolutionary [2] and quantum computing [3] in the late 1990s. The potential advantages of parallelism, which is inherent in quantum computing by superposition of basic states in qubit registers and simultaneous evaluation of all possible represented states, make it possible to improve the algorithms of computational intelligence, combining the advantages of quantum and evolutionary computing. The quantum representation of potential solutions uses the concept of qubits. A qubit can be in state 0 or 1, or a superposition of these states [2]. The state of a qubit can be represented as follows $\Psi >= \alpha|0 + \beta|1$ [3], where α and β are complex numbers that determine the probability of the amplitudes of the corresponding states. At the same time, it determines the probability that the qubit is in state 0, respectively, determines the probability of finding the qubit in state 1 and normalization $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ is performed. So, one qubit is defined by a pair of complex numbers $\begin{bmatrix}\alpha \\ \beta\end{bmatrix}$, and the individual qubit (potential solution) is represented with

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 | \alpha_2 | & \dots & | \alpha_j \\ \beta_1 | \beta_2 | & \dots & | \beta_j \end{bmatrix}$$

where $|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2 = 1, \quad i = 1,2,...,m$.

In this case, the sequence of j qubits represents a quantum system with 2^j states: this representation has the advantage that it is able to represent a linear superposition of states and therefore has better characteristics with respect to a variety of solutions. Thus, a quantum population is defined by a set of quantum chromosomes or vectors $Q(t) = \{q^t_1, q^t_2, \dots, q^t_n\}$. The basic scheme of the quantum evolutionary algorithm (QEA) is presented below.

Algorithm A4
{
Initialization – generation of a quantum population Q(t) in the form of Q-bits
While (the stop condition is not met)
{

Generation of the binary population P(t) from a quantum population with binary observation
Fitness evaluation values in the binary population P(t) and selection of the best individuals
Generation of the offsprings – individuals of a new quantum population Q(t) using quantum gates
}
}

During population initialization, the amplitude values of all qubits in the chromosomes are set to values representing a quantum superposition of all states with equal probabilities. Next, a population $P(t)$ is generated, consisting of classical chromosomes or bit strings. This population is the result of measuring or observing the states of qubits in the quantum chromosomes of the $Q(t)$ population. After measurement(observation), we obtain a classical population $P(t)$, which is defined by a set of binary strings (or vectors). The binary observation of a qubit is modeled by collapse of the wave function [1, 4, 5] as follows:

$$\begin{cases} p(\alpha) \le \left|\alpha_j^2\right|, & x_j = 0 \ (basisstate\left|0\right\rangle) \\ p(\alpha) \le \left|\alpha_j^2\right|, & x_j = 1 \ (basisstate\left|1\right\rangle) \end{cases},$$

where p(a) is a random number in the range [0, 1). Thus, after measurements, we get a classical population of $P(t)$ – a set of binary strings

$$\begin{array}{llllllll} (x_1 & x_2 & x_3 & \ldots & \ldots & x_{j-1} & x_j)_1 \\ (x_1 & x_2 & x_3 & & & x_{j-1} & x_j)_2 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ (x_1 & x_2 & x_3 & & & x_{j-1} & x_j)_i \end{array}$$

The purpose of this procedure is to evaluate the values of the fitness function of individuals in a classical population on a conventional digital computer. It should be noted that with a possible future transition from a digital computer to a quantum computer, evaluating the quality of a potential solution can cause serious problems, since this can lead to the collapse of the quantum system, which, in turn, will lead to the destruction of the superposition state. Based on the evaluation results obtained, we find the best individuals in the binary population.

Next, we must use the good solutions found to improve the overall quantum population. To do this, in next step, we return to the quantum representation again and here we «twist» the quantum chromosomes towards the found good

solutions. This is done using quantum rotation gates, which here play the role of variable operators (instead of crossing and mutation in traditional evolutionary algorithms). Although there are several quantum update operators, the most characteristic of them, as we have seen, is interference or rotation of *Q*-gates. The rotation operator or quantum interference is defined as the gate $U(t)$:

$$U(t) = \begin{pmatrix} Cos(\delta\theta_j) & -Sin(\delta\theta_j) \\ Sin(\delta\theta_j) & Cos(\delta\theta_j) \end{pmatrix}$$

Using this operator, the evolution of a population is the result of a process of unitary transformations. In particular, these are rotations that bring the state of the chromosomes closer to the state of the optimal chromosome in the population(it is shown at fig.1). Thus, this valve enhances or decreases the amplitude of qubits or genes for the chromosome with maximum fitness $f(x_1, x_2, x_3, \ldots, x_j)_i^{\max}$. Consequently, the evolution of the quantum state is controlled by the best individual

$$\begin{pmatrix} \alpha_j^{t+1} \\ \beta_j^{t+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Cos(\delta\theta_j) & -Sin(\delta\theta_j) \\ Sin(\delta\theta_j) & Cos(\delta\theta_j) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_j^{t} \\ \beta_j^{t} \end{pmatrix},$$

where $\begin{pmatrix} \alpha_j^{t} \\ \beta_j^{t} \end{pmatrix}$ and $\begin{pmatrix} \alpha_j^{t+1} \\ \beta_j^{t+1} \end{pmatrix}$ and the amplitudes of the qubit j before and after the update, respectively.

In the general case, the angle of rotation is obtained according to the following expression $\delta\theta = sg(\alpha_j, \beta_j)\Delta\theta_j$, where $sg(\alpha_j, \beta_j)$ and $\Delta\theta_j$ represent the direction and the rotation value, respectively. It should be noted that the value of the rotation angle plays the role of the "ratio of evolution". Therefore, we must avoid values that are too high or too low. The values of these parameters are determined using lookup tables, where the fitness of the current chromosome $f(x_j)$ is usually compared with the fitness of the best individual $f(b_j)$. Note that the rotation operator plays the role of a selection operator in the classical genetic algorithm, where the selection operator mimics Darwinian natural selection by increasing the population by promoting individuals with better fitness and punishing the worst individuals. However, in the quantum genetic algorithm, the selection pressure is replaced by a change in all individuals towards the best individual. Therefore, when the population is updated using the rotation operator, the population converges to better states, but sometimes quantum evolutionary algorithms fall into the trap of local optima prone to premature convergence. In

order to avoid this problem, sometimes quantum genetic algorithms include either roulette or elite selection.

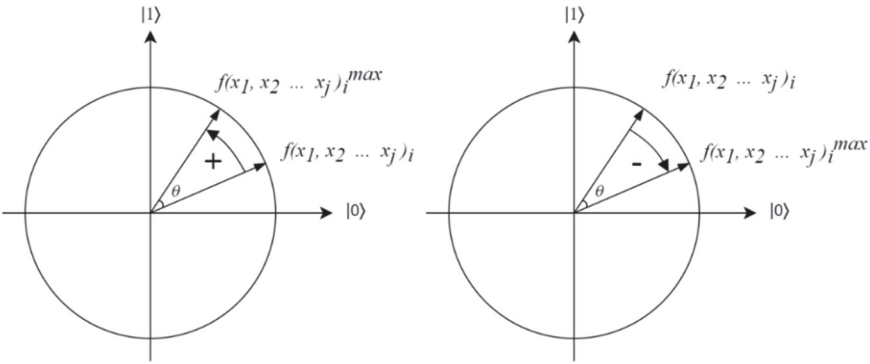


Fig. 1. Rotation gate

The disadvantage of the rotation operator is that the lookup table depends on the optimization task, which affects the operation of the algorithm. In addition, when converting a quantum chromosome, other quantum gates can be used, such as, for example, a NON-inverter, a controlled NON-inverter, Hadamard, etc. Then the main cycle repeats. In the process of solution searching, the population $Q(t)$ and the set of binary solutions $P(t)$ in the generation of t solutions gradually narrows down. The probability of cases with large values of the fitness function increases, and step by step the process moves to the local search stage. That is, the quantum evolutionary algorithm (QEA) starts with a global search and automatically switches to a local search due to its structural characteristics. Since a quantum individual (potential solution) can include the past history of an individual, a set of all possible solutions can be found, starting even from one chromosome.

4. Comparison of probabilistic and quantum evolutionary algorithms

The similarity of these algorithms. The analysis of pseudocodes of algorithms shows that quantum evolutionary algorithms can be considered as a special type of distribution estimation algorithms (EDA). Their interrelation deserves a more detailed consideration [6, 7]. First of all, probabilistic evolutionary algorithms use not an explicit (direct) representation of a population (set) of potential solutions to a problem, but some representation of a probability distribution. For example, it can be a probability vector for a first-order EDA. According to this

basic idea, a relatively small subset of binary solutions is explicitly generated in EDA. In quantum evolutionary algorithms, the main one is the quantum (qubit) representation (encoding), which is very close to the probability distribution in meaning. Note that in step 3, in both algorithms, a relatively small subset of binary strings is generated from the main representation. In quantum evolutionary algorithms, this is done with binary observation. Next, in step 4, both algorithms evaluate all potential solutions and select the best ones. Further, in both algorithms, the obtained best solutions are used to correct the basic representation of potential solutions. In the case of EDA, the parameters of the probability distribution shift towards the best solutions [1, 2]. For example, the components of the probability vector are adjusted. In quantum evolutionary algorithms, the state of qubits is also "adjusted" towards the best solutions found, as a rule, using rotation vectors [1, 4, 5]. Thus, quantum evolutionary algorithms follow the same strategy, directing their search in a given solution space. Moreover, they create and gradually modify a variety of probabilistic models.

Table 1

Similarity of algorithms

Probabilistic	Quantum
Random binary population P(t) generation *while (the stop criterion is not met)* *{* *Binary subpopulation generation - selection of M individuals in accordance with the fitness* *Evaluation of fitness values in the binary population P(t) and calculation of new statistics* *Next population (offsprings) generation using corrected statistics* *}*	*Random quantum population Q(t) generation* *while (the stop criterion is not met* *{* *Binary subpopulation generation from a quantum population with binary observation* *Evaluation of fitness values in the binary population P(t) and selection of the best individuals* *Next quantum population Q(t) (offsprings) generation using quantum gates* *}*

The main difference between the algorithms under consideration is the form of representation (encoding) of potential solutions. The use of probabilistic properties is a fundamental property of all evolutionary algorithms, and EDAS can use them in the process of selecting and replacing individuals in a population, while quantum evolutionary algorithms apply them in the process of observation

when generating a small virtual population. The differences between evolutionary and quantum evolutionary algorithms are presented in Table 2.

Table 2

Differences in algorithms

	Probabilistic	Quantum
Motivation	A combination of EA with machine learning in order to study the impact of knowledge about current individuals on the generation of offspring	The use of quantum mechanics models to represent and evolve potential solutions
Representation (encoding)	Probability representation (for example, probability vector)	Q-bit representation
Population	A population requires a sufficiently large number of individuals to avoid a significant shift in the local probability.	The population may be small, even from a single quantum individual
Application	Mainly combinatorial optimization	Combinatorial and numerical optimization
Development	Efficient estimation methods for conditional probabilities and numerical optimization	Improving efficiency by introducing new concepts in EA (quantum registers, interference, quantum entanglement) to solve more complex problems, including dependent variables

In general, we can say that the presented quantum evolutionary algorithms relate to probabilistic evolutionary algorithms of the first order, which assume independent variables and where the probabilistic model is a vector of probabilities. This family of EDAS, although simple, should not be discredited a priori, since the benefits of searching for complex alternating interactions may still be unclear under certain circumstances [14, 15].

Conclusion

These algorithms have a lot in common, and in the process of finding solutions, they essentially use probabilistic models and properties of a population of potential solutions. Conventionally, these quantum algorithms can be attributed to the group of probabilistic evolutionary algorithms (EDA) of the first order.

References

1. Dan Simon. Evolutionary optimization algorithms. Biologically-Inspired and Population-Based Approaches to Computer Intelligence. 2013. New York; Wiley & Sons, 742 p.

2. Skobtsov Y,A. Modern evolutionary computation: hand book. Saint-Petersburg: State University of Aerospace Instrumentation, 2024. 372 p. (in Russian).

3. Nielsen, M.A., Chuang, I.L. Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.

4. P. W. Shor. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. In: Proceedings of 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science, IEEE Press, Los Alamitos, CA, 1994.

5. Grover L.A fast quantum mechanical algorithm for database search. In: Proceedings of the 28th Annual ACM Symposium on Theory of Computing, ACM, 1996. P. 212–219.

6. Narayanan A., Moore M., "Quantum-inspired genetic algorithms, In: Proc. 1996 IEEE Int. Conf. Evolutionary Computation. Piscataway,NJ: IEEE Press, May 1996. P. 61–66.

7. R. Lahoz-Beltra. Quantum Genetic Algorithms for Computer Scientists, Computers, 2016, 5, 24, doi:10.3390/computers5040024.

8. Ross M. H. O. A review of quantum-inspired metaheuristics: Going from classical computers to real quantum computers IEEE Access, 8 (2020). P. 814–838.

9. A. V. Abs da Cruz, M. M. B. R. Vellasco, and M. A. C. Pacheco. Quantum inspired evolutionary algorithm for numerical optimization. In 2006 IEEE International Conference on Evolutionary Computation, July, 2006. P. 2630–2637.

10. F. S. Alfares and I. I. Esat. Real-coded quantum inspired evolution algorithm applied to engineering optimization problems. In Second International Symposium on Leveraging Applications of Formal Methods, Verification and Validation, 2006, Nov 2006. P. 169–176.

11. M. Jamil and X. Yang. A literature survey of benchmark functions for global optimization problems. CoRR, abs/1308.4008, 2013.

12. Zhang G. Quantum-inspired evolutionary algorithms: a survey and empirical study. J Heuristics ,2011, 17. P. 303–351.

13. Pelikan M., Goldberg D., Lobo F.G.: A survey of optimization by building and using probabilistic models. Comput. Optim. Appl. 21, 5–20. 2002.

14. Skobtsov Y.Genetic Quantum Algorithms with Binary Observation. Cyber-Physical Systems. Studies in Systems, Decision and Control, vol 554. Springer, Cham.2024. P. 219–231.

15. Platel D.V., Schliebs S., Kasabov N. Quantum-inspired Evolutionary Algorithm: A multi-model EDA, IEEE Transactions on Evolutionary Algorithm: A multi0model EDA, 2008, 3. P. 1–16.

М.Ш. МУСАЕВ, В.И. ТЮГОВА, Д.О. ГУРЬЯНОВ, А.В. ВОЛОСОВА
Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
musaevmsh@student.bmstu.ru

КРИТЕРИИ КОГНИТИВНОЙ ИНТЕРПРЕТАЦИИ АДАПТИВНОГО ПОВЕДЕНИЯ PHYSARUM POLYCEPHALUM

Рассматривается проблема когнитивной интерпретации адаптивного поведения безнервного организма Physarum polycephalum. Работа имеет теоретико-аналитический характер и основана на сопоставлении работ по минимальному познанию, агентному моделированию и экспериментальным исследованиям слизевика. Выделены критерии когнитивно интерпретируемой адаптации: сенсомоторное сопряжение, обучение, память, временное упреждение, внешняя память и выбор между альтернативами. Обосновано, что ряд описанных в литературе форм поведения Physarum polycephalum допускает интерпретацию в рамках этих критериев.

Ключевые слова: *адаптивное поведение, минимальное познание, когнитивная адаптация, Physarum polycephalum, слизевик, габитуация, память, имитационное моделирование.*

Введение

Проблема адаптивного поведения занимает важное место в биологии, когнитивной науке и имитационном моделировании. Обычно адаптация понимается как способность системы изменять своё состояние или поведение под влиянием внешних условий. Однако при анализе живых организмов возникает более сложный вопрос: всегда ли адаптация является только непосредственной реакцией на стимул или в отдельных случаях она может рассматриваться как проявление минимального познания.

В классических работах по физиологии активности и теории функциональных систем подчёркивалось, что поведение организма не сводится к линейной схеме «стимул — реакция», а включает обратную связь, коррекцию действия и поддержание целостности системы в изменяющихся условиях [1, 2]. В современных теориях минимального и базального познания эта идея получила развитие: познание рассматривается не только как свойство организмов с развитой нервной системой, но и как функциональная способность живой системы поддерживать устойчивое взаимодействие со

средой [3, 4]. Для дальнейшего анализа важны также различение реактивных и более сложных агентных архитектур [5] и представление о возможном участии среды в когнитивном контуре [6].

Особенно интересным объектом для такого анализа является Physarum polycephalum. В плазмодиальной фазе этот организм представляет собой многоядерную клетку, лишённую нервной системы и централизованного управляющего органа. Тем не менее для него описаны сложные формы адаптивного поведения: поиск эффективных путей, формирование транспортных сетей, перестройка протоплазматических трубок, габитуация, сохранение следов прошлого опыта, использование внешних следов при навигации и временное упреждение неблагоприятных воздействий [7–15].

Вопрос о когнитивной природе такого поведения требует осторожной постановки. Некорректно утверждать, что слизевик обладает сознанием или мышлением в человеческом смысле. Однако столь же некорректно заранее исключать когнитивную интерпретацию только на основании отсутствия нейронов. Если когнитивность определяется функционально, через способность системы использовать опыт, память, обратную связь и выбор действия, то поведение Physarum polycephalum требует отдельного анализа.

В имитационном моделировании сходная проблема проявляется в различии между реактивными агентами, действующими по фиксированным правилам, и более сложными адаптивными системами, способными учитывать внутреннее состояние и историю взаимодействий [5]. Поэтому изучение слизевика важно не только для биологии, но и для построения моделей адаптивного поведения.

Целью данной работы является выделение критериев когнитивной интерпретации адаптивного поведения Physarum polycephalum и сопоставление этих критериев с известными экспериментальными данными.

Постановка задачи

В работе рассматривается не доказательство сознания у Physarum polycephalum, а обоснование возможности когнитивной интерпретации его адаптивного поведения в минимальном функциональном смысле. Такая постановка позволяет избежать антропоморфизма и одновременно не сводить поведение безнервного организма к простой физиологической реакции.

Объектом исследования является адаптивное поведение Physarum polycephalum в плазмодиальной фазе. Предметом исследования являются признаки, по которым данное поведение может быть интерпретировано как когнитивное в рамках концепции минимального познания.

Под когнитивно интерпретируемой адаптацией в данной работе понимается такая форма поведения, при которой реакция системы определяется не только текущим внешним воздействием, но и историей предыдущих взаимодействий, внутренним состоянием организма, изменением его структуры или следами, оставленными во внешней среде.

Требования к предлагаемому решению состоят в следующем. Во-первых, критерии должны быть связаны с наблюдаемыми экспериментальными проявлениями. Во-вторых, они не должны основываться на признаках, характерных только для организмов с нервной системой. В-третьих, критерии должны позволять отличить когнитивно интерпретируемую адаптацию от простой реакции, сенсорной адаптации или утомления. В-четвёртых, вывод должен быть ограниченным: речь идёт о минимальном познании, а не о сознании, намерениях или символическом мышлении.

Методы теоретического анализа

Работа выполнена как теоретико-аналитическое исследование. Использованы анализ научной литературы, сравнительно-концептуальное сопоставление и функциональная интерпретация экспериментальных данных. В корпус источников включались работы, формулирующие рамку минимального или базального познания, описывающие принципы агентного моделирования адаптивного поведения и экспериментальные исследования Physarum polycephalum, связанные с обучением, памятью, навигацией, временным упреждением или выбором между альтернативами.

Предлагаемые критерии относятся к разным уровням описания поведения, однако объединены общей функцией: каждый из них позволяет отличить непосредственную реакцию на стимул от поведения, зависящего от истории взаимодействий, внутреннего состояния организма или изменённой среды.

Критерии когнитивной интерпретации

В имитационном моделировании адаптация обычно понимается как изменение параметров, состояния или правил функционирования модели при поступлении информации. На простейшем уровне адаптация может выражаться в настройке коэффициентов, порогов или весов. Однако в сложных системах адаптация может затрагивать не только параметры, но и поведение, структуру системы и способ взаимодействия со средой.

Для анализа Physarum polycephalum принципиально важны структурный и средовой уровни адаптации. Его поведение формируется не только

за счёт реакции на химические и физические стимулы, но и через перестройку сети протоплазматических трубок. Участки, по которым проходит интенсивный поток, усиливаются; участки, не участвующие в эффективном движении, постепенно деградируют. Поэтому тело организма одновременно является средством движения, носителем следов прошлого опыта и механизмом перераспределения будущей активности. Данный процесс в виде схемы показан на рисунке 1, иллюстрирующем замкнутый сенсомоторный контур, в котором перестройка тела одновременно является следствием адаптации и фактором изменения последующего восприятия среды.

Для перехода от общей адаптации к когнитивной интерпретации в данной работе используются шесть критериев: сенсомоторное сопряжение, обучение, память, временное упреждение, внешняя память и выбор между альтернативами (табл. 1).

Сенсомоторное сопряжение означает, что действие организма изменяет дальнейшее восприятие среды. Обучение означает устойчивое изменение поведения под влиянием опыта. Память предполагает, что прошлое воздействие продолжает влиять на поведение после исчезновения самого стимула. Временное упреждение означает, что система реагирует не только на воздействие, но и на временную структуру повторяющихся событий. Внешняя память возникает тогда, когда следы, оставленные организмом в среде, начинают выполнять информационную функцию [6]. Выбор между альтернативами означает наличие конкурирующих вариантов поведения и механизма отбора одного из них.

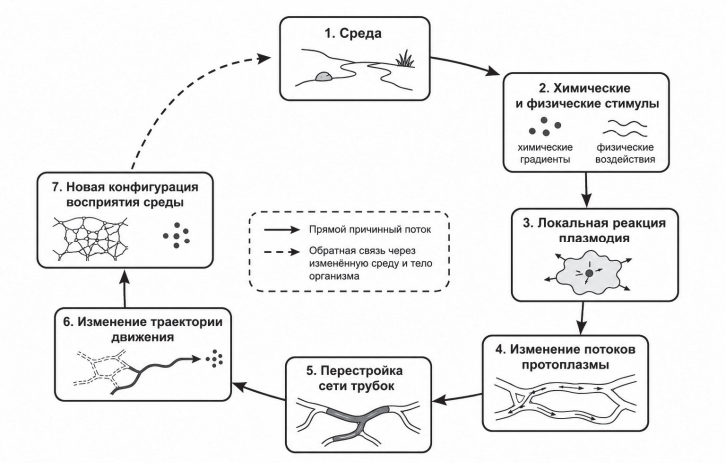


Рис. 1. Сенсомоторный контур адаптивного поведения Physarum polycephalum

Таблица 1

Критерии когнитивной интерпретации адаптивного поведения Physarum polycephalum

Критерий	**Содержание критерия**	**Проявление у Physarum polycephalum**	**Отличие от простой реакции**
Сенсомоторное сопряжение	Действие организма меняет дальнейшее восприятие среды	Перестройка траектории движения и сети трубок	Возникает замкнутый контур «восприятие – действие – новое восприятие»
Обучение	Поведение изменяется после повторного опыта	Габитуация к неблагоприятным раздражителям	Ответ зависит от истории взаимодействий, а не только от текущего стимула
Память	Прошлый опыт влияет на будущую реакцию	Химический и морфологический след	Эффект сохраняется после исчезновения исходного воздействия
Временное упреждение	Реакция зависит от периодичности прошлых событий	Замедление движения в ожидаемый момент	Поведение изменяется до повторного предъявления стимула
Внешняя память	Информация частично хранится во внешней среде	Использование собственного слизевого следа	Среда становится частью регуляторного контура
Выбор альтернатив	Конкурирующие варианты поведения приводят к отбору одного из них	Перераспределение активности между источниками пищи	Наблюдается распределённый отбор, а не единичная рефлекторная реакция

Предлагаемая система критериев имеет операциональный характер: она не решает вопрос о субъективном опыте, но позволяет определить, в каких случаях адаптивное поведение может быть рассмотрено как минимально

когнитивное. При этом на рис. 1 представлена визуальная интерпретация сенсомоторного контура, тогда как в табл. 1 структурирована информация о шести наблюдаемых феноменах поведения, что позволяет различать когнитивно интерпретируемую адаптацию и простую реакцию.

Physarum polycephalum как объект анализа

Physarum polycephalum в плазмодиальной фазе представляет собой многоядерную клетку с развитой сетью протоплазматических трубок. По этим трубкам циркулирует эндоплазма, а локальные сокращения создают переменные потоки вещества. Эти потоки зависят от химических градиентов, локального состояния организма и конфигурации уже сформированной сети.

Классические эксперименты показали, что слизевик способен находить эффективный путь в лабиринте [7]. Позднее были предложены математические модели, описывающие адаптивную перестройку транспортной сети слизевика: проводимость канала усиливается при интенсивном потоке и уменьшается при его отсутствии [8]. В дальнейшем было показано, что подобные принципы позволяют строить сети, сочетающие эффективность, экономичность и устойчивость к повреждениям [9].

Эти результаты показывают, что поведение слизевика не является хаотическим ростом: оно приводит к функционально организованной структуре. При этом сама структура сети становится носителем информации о прошлых взаимодействиях. У слизевика нет отдельного центра обработки, но есть распределённый физический субстрат, в котором движение, память и принятие решения связаны друг с другом.

В отличие от организмов с нервной системой, у Physarum polycephalum нельзя выделить отдельный орган, отвечающий за управление поведением. Однако регуляция реализуется через локальные взаимодействия: химическую чувствительность, ритмические сокращения, перераспределение потоков и изменение геометрии трубок. Именно поэтому слизевик является удобным объектом для анализа минимального познания и распределённой адаптации.

Сопоставление критериев с экспериментальными данными

Одним из наиболее строгих аргументов в пользу когнитивной интерпретации адаптации слизевика является экспериментально подтверждённая габитуация. В [12] Physarum polycephalum многократно сталкивался с неблагоприятным, но не смертельным раздражителем — хинином или кофеином. При повторении воздействия организм постепенно снижал выраженность реакции избегания.

Важно, что в [12] проверялось не просто снижение реакции. Были показаны признаки, позволяющие отличить габитуацию от утомления или сенсорной адаптации: специфичность к стимулу и спонтанное восстановление после отдыха. С учётом критериев габитуации, сформулированных в [16], это позволяет говорить о наличии у безнервного организма базовой формы обучения.

Второй блок связан с памятью. В [13] исследовалось сохранение следов прошлого опыта после привыкания к солевому барьеру. Было показано, что слизевик может удерживать информацию о неблагоприятном воздействии, а одним из возможных механизмов является поглощение и удержание ионов натрия. Такая память имеет физико-химический носитель и влияет на последующее поведение.

Дополнительный аргумент даёт работа [14], в которой память связывается с морфологией транспортной сети. Показано, что информация о прошлом взаимодействии с источником пищи может быть закодирована в иерархии диаметров трубок. Это означает, что структура тела слизевика не только обеспечивает движение, но и сохраняет следы прошлого опыта.

Третий блок связан с временным упреждением. В [10] плазмодий подвергался серии неблагоприятных воздействий, предъявляемых через равные интервалы времени. После прекращения воздействий слизевик замедлял движение примерно в тот момент, когда ожидалось следующее воздействие. Этот результат не следует трактовать как прогнозирование в человеческом смысле, но он показывает, что поведение организма зависит от временной структуры прошлого опыта.

Четвёртый блок связан с внешней пространственной памятью. В [11] показано, что слизевик использует оставленный им слизевой след при навигации в сложной среде. След позволяет организму избегать уже исследованных областей и тем самым уменьшать повторное обследование пространства. В функциональном смысле часть информации о прошлом поведении хранится во внешней среде.

Пятый блок относится к распределённому принятию решений. В экспериментах по выбору между двумя альтернативами было показано, что Physarum polycephalum способен перераспределять активность между источниками и постепенно смещаться к более выгодному варианту [15]. Здесь нет центрального органа выбора, но есть конкуренция направлений роста, перераспределение потоков и постепенный отбор устойчивой конфигурации.

Сопоставление показывает, что наиболее сильная доказательная база сформирована для обучения, памяти, морфологической памяти и внешней пространственной памяти. Временное упреждение и выбор между альтер-

нативами требуют более осторожной интерпретации, но также показывают, что поведение слизевика определяется не только текущим стимулом, но и историей взаимодействий со средой.

Границы когнитивной интерпретации

Когнитивная интерпретация поведения Physarum polycephalum требует явных ограничений. Наличие габитуации, памяти, внешней памяти и временного упреждения не означает, что слизевик обладает сознанием, субъективным опытом или мышлением в человеческом смысле. В данной работе не утверждается, что он формирует символические представления, имеет намерения или осознаёт свои действия.

Корректный вывод состоит в другом: поведение слизевика не сводится к простой схеме «стимул – реакция». В ряде случаев реакция организма определяется не только текущим воздействием, но и историей взаимодействий, физико-химическим состоянием, морфологией сети и следами во внешней среде. Поэтому адаптацию Physarum polycephalum можно рассматривать как форму минимального познания, если под познанием понимать функциональную способность живой системы использовать сенсомоторный контур, память и выбор для поддержания взаимодействия со средой.

Такой подход не противоречит отсутствию нервной системы. Нервная система является одним из возможных способов реализации когнитивных функций, но не единственным. У слизевика аналогичные по функции механизмы реализуются через распределённые потоки, ритмические сокращения, химические градиенты, изменение диаметра трубок и внешние следы.

Значение для имитационного моделирования

Для имитационного моделирования главный результат состоит в том, что Physarum polycephalum может рассматриваться не только как источник эвристических алгоритмов поиска путей, но и как прототип распределённой адаптивной системы. В такой системе память, выбор и перестройка структуры реализуются без центрального контроллера. Это делает модели по типу Physarum особенно важными для задач, где среда изменчива, глобальная информация неполна, а решение должно возникать через локальные взаимодействия.

Практическая значимость такого подхода состоит в том, что критерии когнитивно интерпретируемой адаптации могут использоваться при

проектировании моделей, в которых память, выбор и перестройка структуры реализуются не через централизованный управляющий модуль, а через локальные взаимодействия агентов и изменение среды.

В ранее выполненной авторами работе [17] модель Physarum polycephalum применялась к задаче построения и оптимизации транспортных сетей в сложной среде, при этом акцент делался на алгоритмическую эффективность. В отличие от [17], настоящая статья сосредоточена не на инженерном применении, а на теоретическом обосновании: здесь показано, почему биоинспирированные модели на основе Physarum могут интерпретироваться как модели распределённой адаптации. Кроме того, в работе предлагается система критериев, позволяющая рассматривать Physarum polycephalum в качестве прототипа когнитивно интерпретируемой системы.

Заключение

Проведённый анализ показывает, что адаптивное поведение Physarum polycephalum не сводится к простой схеме «стимул – реакция». Для него экспериментально описаны свойства, значимые для когнитивной интерпретации: сенсомоторное сопряжение, обучение, память, временное упреждение, внешняя пространственная память и распределённый выбор между альтернативами.

Наиболее убедительные данные получены для габитуации, сохранения следов прошлого опыта, морфологической памяти и использования внешних следов при навигации. Временное упреждение и распределённое принятие решений требуют более осторожной трактовки, но также показывают, что поведение слизевика определяется не только текущим стимулом, но и историей взаимодействий со средой.

Полученные результаты не дают оснований приписывать слизевику сознание или человеческое мышление. Однако они позволяют рассматривать его адаптацию как когнитивно интерпретируемую в рамках минимального познания. Для имитационного моделирования это означает, что системы, вдохновлённые Physarum polycephalum, могут использоваться как модели распределённой когнитивной адаптации.

Список литературы

1. Бернштейн Н.А. О построении движений. М.: Медгиз, 1947. 255 с.
2. Анохин П.К. Узловые вопросы теории функциональной системы. М.: Наука, 1980. 197 с.

3. van Duijn M., Keijzer F., Franken D. Principles of Minimal Cognition: Casting Cognition as Sensorimotor Coordination // Adaptive Behavior. 2006. Vol. 14. No. 2. P. 157–170.

4. Lyon P. The Biogenic Approach to Cognition // Cognitive Processing. 2006. Vol. 7. No. 1. P. 11–29.

5. Balke T., Gilbert N. How Do Agents Make Decisions? A Survey // Journal of Artificial Societies and Social Simulation. 2014. Vol. 17. No. 4. Art. 13.

6. Clark A., Chalmers D. The Extended Mind // Analysis. 1998. Vol. 58. No. 1. P. 7–19.

7. Nakagaki T., Yamada H., Tóth Á. Maze-Solving by an Amoeboid Organism // Nature. 2000. Vol. 407. P. 470.

8. Tero A., Kobayashi R., Nakagaki T. A Mathematical Model for Adaptive Transport Network in Path Finding by True Slime Mold // Journal of Theoretical Biology. 2007. Vol. 244. No. 4. P. 553–564.

9. Tero A., Takagi S., Saigusa T., Ito K., Bebber D.P., Fricker M.D., Yumiki K., Kobayashi R., Nakagaki T. Rules for Biologically Inspired Adaptive Network Design // Science. 2010. Vol. 327. No. 5964. P. 439–442.

10. Saigusa T., Tero A., Nakagaki T., Kuramoto Y. Amoebae Anticipate Periodic Events // Physical Review Letters. 2008. Vol. 100. No. 1. Art. 018101.

11. Reid C.R., Latty T., Dussutour A., Beekman M. Slime Mould Uses an Externalized Spatial “Memory” to Navigate in Complex Environments // Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA. 2012. Vol. 109. No. 43. P. 17490–17494.

12. Boisseau R.P., Vogel D., Dussutour A. Habituation in Non-Neural Organisms: Evidence from Slime Moulds // Proceedings of the Royal Society B. 2016. Vol. 283. No. 1829. Art. 20160446.

13. Boussard A., Delescluse J., Pérez-Escudero A., Dussutour A. Memory Inception and Preservation in Slime Moulds: The Quest for a Common Mechanism // Philosophical Transactions of the Royal Society B. 2019. Vol. 374. No. 1774. Art. 20180368.

14. Kramar M., Alim K. Encoding Memory in Tube Diameter Hierarchy of Living Flow Network // Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA. 2021. Vol. 118. No. 10. Art. e2007815118.

15. Reid C.R., MacDonald H., Mann R.P., Marshall J.A.R., Latty T., Dussutour A. Decision-Making without a Brain: How an Amoeboid Organism Solves the Two-Armed Bandit // Journal of the Royal Society Interface. 2016. Vol. 13. No. 119. Art. 20160030.

16. Rankin C.H., Abrams T., Barry R.J., Bhatnagar S., Clayton D.F., Colombo J., Coppola G., Geyer M.A., Glanzman D.L., Marsland S., McSweeney F.K., Wilson D.A., Wu C.-F., Thompson R.F. Habituation Revisited: An Updated and Revised Description of the Behavioral Characteristics of Habituation // Neurobiology of Learning and Memory. 2009. Vol. 92. No. 2. P. 135–138.

17. Volosova A.V., Musaev M.Sh., Tyugova V.I., Guryanov D.O. Using the Physarum polycephalum Model to Build and Optimize Transport Networks in the Arctic // Proceedings of the 2026 International Conference on Integrated Intelligence and Cognitive Engineering. Dubai, UAE. 2026. В печати.

ИМЕННОЙ УКАЗАТЕЛЬ АВТОРОВ

– C –

Chernyadiev I.V., 121

– D –

Deeb M., 49
Deroy A., 238

– F –

Fandresena R.M., 440

– G –

Gavrilov A.I., 440
Gorbachenko V.I., 153

– I –

Isaeva E., 227

– L –

Lamcev O.A., 121
Li S., 474
Liang C., 408

– M –

Maksimova A.Y., 121

– P –

Pribadi P.O.A., 408

– R –

Ruchkin K.A., 164

– S –

Skobtsov V., 484
Skobtsov YU., 484
Smolin V.S., 474
Stenkin D.A., 153
Sungurova A., 227
Syrovatkin S., 13

– W –

Wang S., 474

– А –

Абросимова В.Д., 256
Алексеева В.М., 256
Ананикян А.Г., 327
Андреева Н.В., 60, 91
Андрулис В.В., 134
Антонов В.Д., 176
Арутюнян А.Г., 134

– Б –

Бабич Н.А., 38
Базенков Н.И., 359
БриллиантоВ Н.В., 102

– В –

Виноградова Л.В., 467
Волосова А.В., 495

– Г –

Габдрахманова Н.Т., 143
Гальтяев А.В., 457
Гарамов К.А., 71
ГергедавА Д.А., 431
Горшкова Т.А., 256
Грачев Д.Р., 467
Громовой С.С., 134
Губа А.В., 134
Гурьянов Д.О., 495
Гусева А.И., 199

– Д –

Демкина Е.И., 256
Дорогов А.Ю., 302
Дроздов Д.П., 318
Дудкин А.П., 91

– Е –

Ермаков И.А., 111

– З –

Звонарев И.С., 346

– К –

Казанцев В.Б., 134
Канев А.И., 111, 399
Караваев Ю.Л., 346
Карандашев Я.М., 431
Карасаев Д.С., 209
Каримуллина Л.Б., 102
Квашнин Д.Г., 102
Кисельников А.А., 256
Ковалёв Н.А., 134
Коновалов М.А., 209
Константинова Д.А., 71
Кочкаров А.А., 176

– Л –

Левичев М.Ю., 134
Линь Ю., 219
Лисачев П.Д., 247
Лобов С.А., 71
Любин М.В., 336
Лятифов Р.Э., 369

– М –

Малых В.А., 188, 209
Мартиросян З.К., 209
Марьясин О.Ю., 378
Мацаков Б.В., 209
Митюрева Д.Г., 256
Михейкин М.Е., 256
Мусаев М.Ш., 495
Мысин И.Е., 431

– Н –

Носов А.С., 143

– О –

Оранов А.А., 418

– П –

Пивоваров И.О., 266
Проскура А.Л., 247

– Р –

Ратушняк А.С., 247
Рыбалко А.В., 38
Рындин Е.А., 60, 91

– С –

Сварник О.Е., 457
Свиридов Н.Н., 359
Скрипкина С.М., 256
Слеповичев И.И., 292
СулеймановА Е.М., 467
Сысоев И.В., 467

– Т –

Тарасова Д.М., 256
Тарков М.С., 81
Тихомиров Л.И., 378
Тюгова В.И., 495

– Ф –

Фазульянов Д.В., 199
Филиппов И.И., 389
Фирсов А.А., 418
Фрадков А.Л., 38

– Х –

Халид В., 134
Хамитов К.А., 60

– Ш –

Шапошников П.Д., 28

– Щ –

Щербань И.В., 28

– Ю –

Юдкин Ф.А., 418

– Я –

Яковлев К.С., 318, 327, 336