УДК 517.9

Моделирование самообучающихся систем

© О. А. Зубова[1]

Аннотация. Наблюдательное обучение, или обучение через примеры, относится к системам, которые тренируются, а не программируются, на некотором наборе примеров, то есть на множестве пар входных/выходных данных. Системы, которые могут обучаться на примерах выполнению какой-то конкретной задачи, имеют множество приложений в различных областях современной жизни.

Ключевые слова: классификация, пространство, обучение, множество, алгоритм, отношение.

Системы, которые могут обучаться на примерах выполнению какой-то конкретной задачи, имеют множество приложений в различных областях современной жизни. Например, были разработаны алгоритмы, которые могут производить диагностику типа ракового заболевания, исходя из множества измерений уровня выраженности нескольких тысяч человеческих генов в биопсии опухоли, сравненных с микрокомплектом cDNA, содержащим некоторое количество генов. Программное обеспечение обучается правилам классификации по набору примеров, то есть по множеству моделей выраженности тех или иных генов у определенного количества пациентов, диагноз которых известен. Проблемой в данном случае является большая размерность пространства входных параметров - порядка 20 000 генов - и мизерное количество обучающихся примеров - примерно 50.

В подобных системах предполагается наличие машины, которая обучается выполнению задачи, исходя из некоторого набора данных в форме $(x_i, y_i)_{i=1}^m$. Обучение означает выведение функции, которая наилучшим образом отображает отношения между входными данными x_i и соответствующими им выходными y_i . Главным вопросом теории обучения является то, насколько хорошо эта функция обобщает данные, то есть насколько хорошо она считает выходные параметры для не встречавшихся ранее входных параметров.

Рассмотрим алгоритм построения искомой обобщающей функции $f : X \to Y$ (где X - замкнутое подмножество R^n и $Y \subset R$).

1. Начинаем с "тренировочного"множества $S_m = (x_i, y_i)_{i=1}^m$.

2. Выбираем симметричную, положительно определенную функцию $K_x(x') = K(x, x')$, непрерывную на $X \times Y$. Ядро $K(t, s)$ положительно определено, если $\sum_{i,j=1}^n c_i c_j K(t_i, t_j) \geq 0$ для любых $n \in N$ и любого выбора $t_1, \ldots, t_n \in X$ и $c_1, \ldots, c_n \in R$.

3. Определяем $f : X \to Y$ в виде $f(x) = \sum_{i=1}^m c_i K_{x_i}(x)$, где $c = (c_1, \ldots, c_m)$ и

$$(m\gamma\ I + K)c = y, \tag{1.1}$$

где I - единичная матрица, K - квадратная матрица, состоящая из элементов $K_{i,j} = K(x_i, x_j)$, и y - вектор с координатами y_i . Параметр γ - положительное, вещественное число.

Линейная система уравнений (1.1), содержащая m неизвестных, является корректной, так как матрица K положительна, а матрица $(m\gamma\ I + K)$ строго положительна. Число обусловленности является хорошим, если число $m\gamma$ достаточно велико. Подобный тип уравнений изучался еще со времен Гаусса, и алгоритмы их рационального разрешения представляют одну из наиболее изученных областей численного анализа.

[1]Ассистент факультета ПМ-ПУ СПбГУ, Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, a_v_zubov@mail.ru.

Описанный алгоритм может быть выведен из регуляризации Тихонова. Для того чтобы найти минимизатор ошибки, мы можем попробовать решить некую задачу - называемую Задачей Минимизации Эмпирического Риска (МЭР) - нахождения функции в пространстве H, которая минимизирует выражение

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(f(x_i)-y_i)^2, \tag{1.2}$$

которое, вообще говоря, является некорректным. Корректность (1.2) зависит от выбора пространства гипотез H. Согласно Тихонову, мы будем минимизировать не в пространстве H, а в пространстве гипотез H_k для каждого фиксированного параметра γ следующий регуляризированный функционал

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y_i-f(x_i))^2+\gamma\cdot\|f\|_K{}^2, \tag{1.3}$$

где $\|f\|_k^2$ - норма в H_K Гильбертовом Пространстве Воспроизводящего Ядра (ГПВЯ), определенном ядром K. Последнее слагаемое в выражении (1.3) - называемое регуляризатором - обеспечивает гладкость и единственность решения.

Сначала определим норму $\|f\|_K{}^2$. Рассмотрим пространство линейной оболочки от $K_{\bar{X}_j}$. Здесь принято обозначение $\bar{X}_j$, чтобы подчеркнуть то, что элементы X, используемые в этой конструкции, не имеют, вообще говоря, ничего общего с тренировочным множеством $(x_i)_{i=1}^m$. Определим внутреннее произведение в этом пространстве, положив $\langle K_x, K_{\bar{x}_j}\rangle = K(x,\bar{x}_j)$ и линейно продолжив до $\sum_{j=1}^r a_j K_{\bar{x}_j}$. Пополнение пространства ассоциированной нормой есть ГПВЯ, то есть Гильбертовым пространством H_K с нормой $\|f\|_K^2$. Заметим, что $\langle f, K_x\rangle = f(x)$ для $f\in H_K$ (просто положить $f=K_{\bar{X}_j}$ и продолжить линейно).

Для того чтобы минимизировать функционал в выражении (1.3), мы возьмем его производную по f, рассмотрим ее на элементе $\bar{f}$ из ГПВЯ и приравняем нулю. Тогда мы получим

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y_i-f(x_i))\bar{f}(x_i)-\gamma\cdot\langle f,\bar{f}\rangle=0. \tag{1.4}$$

Выражение (1.4) должно быть истинным для любых $\bar{f}$. В частности, положив $\bar{f} = K_x$, мы имеем $f(x)=\sum_{i=1}^m c_i K_{x_i}(x)$, где $c_i=\frac{y_i-f(x_i)}{m\gamma}$. Тогда уравнение (1.4) получается подстановкой предпоследнего выражения в последнее выражение.

Рассмотрим вышеприведенный алгоритм в контексте фундаментальных понятий теории обучения, одним из которых является *ошибка обобщения.* Для этого предположим, что $(x_i,y_i)_{i=1}^m$ - случайные данные. Тогда существует неизвестная вероятностная мера ρ на производящем множестве $X\times Y$, из которого выбираются данные.

Эта вероятностная мера ρ определяет функцию $f_p : X\to Y$, задаваемую выражением $f_p(x)=\int y d\rho_x$, где ρ_x - условная мера на $X\times Y$.

В силу такого построения f_p, можно говорить о том, что она является точной функцией входных/выходных параметров, отражающей среду, обеспечивающую данные. Тогда размер *ошибки* функции f есть $\int_X (f-f_p)^2 d\rho_X$, где ρ_X - мера на X, порожденная ρ (иногда называемая маргинальной мерой).

Можно сказать, что задачей теории обучения является "нахождение"функции f, минимизирующей эту ошибку. Для нахождения такой функции важно иметь в наличии пространство H - пространство гипотез - для работы. Тогда рассматривают выпуклое пространство непрерывных функций $f : X \to Y$ (где $Y \subset R$), которое, будучи подмножеством $C(X)$, является компактным, где $C(X)$ - Банахово пространство непрерывных функций с мерой $\|f\| = \max_X |f(x)|$.

Начнем с данных $(x_i, y_i)_{i=1}^m = z$, и, минимизируя по $f \in H \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (f(x_i) - y_i)^2$, получим единственную гипотезу $f_z : X \to Y$. Эта f_z называется *эмпирическим оптимумом*, и мы можем сосредоточиться на задаче оценивания

$$\int_X (f_z - f_p)^2 d\rho_X. \tag{1.5}$$

На данном этапе удобно разбить эту задачу на несколько шагов посредством определения "действительного оптимума" f_H, взяв минимум от интеграла $\int_X (f - f_p)^2$ в пространстве H. Тогда

$$\int_X (f_z - f_p)^2 = S(z, H) + \int_X (f_H - f_\rho)^2 = S(z, H) + A(H), \tag{1.6}$$

где $S(z, H) = \int_X (f_z - f_\rho)^2 - \int_X (f_H - f_\rho)^2$.

Первое слагаемое в правой части выражения (1.6) (S) должно быть оценено по вероятности по параметру z, и эта оценка называется *ошибкой выборки* (иногда *ошибкой оценки*). Второе слагаемое, (A), называется *ошибкой аппроксимации*. Сначала рассмотрим оценку для ошибки выборки, которая будет иметь вид $S(z, H) \leq \varepsilon$ с большой достоверностью, эта достоверность будет зависеть от ε и от объема выборки m.

Пусть число Cov# (H, η) есть количество шаров радиуса η в пространстве H, необходимое для покрытия H.Справедливо следующее.

Теорема 1.6. *Предположим, что* $|f(x) - y| \leq M$ *для всех* $f \in H$ *и для почти всех* $(x, y) \in X \times Y$. *Тогда*

$$Prob_{z \in (X \times Y)^m} \{S(z, H) \leq \varepsilon\} \leq 1 - \delta, \tag{1.7}$$

где $\delta = \mathrm{Cov\#}\, (H, \varepsilon/24M) e^{-m\varepsilon/288M^2}$.

Ошибка аппроксимации $\int_X (f_H - f_\rho)^2$ может быть исследована следующим образом. Пусть $B : L^2 \to L^2$ есть компактный, строго положительный (самосопряженный) оператор, E - гильбертово пространство $\{g \in L^2, \ \|B^{-s} g\| < \infty\}$ со скалярным произведением $\langle g, h \rangle_E = \langle B^{-s} g, B^{-s} h \rangle_{L^2}$. Кроме того, предположим, что $E \to L^2$ можно разложить в $E \to C(X) \to L^2$ с хорошо обусловленным и компактным включением $J_E : C(X) \urcorner E$.

Теорема 1.7. *Пусть* $0 < r < s$ *и* H *есть* $\overline{J_E(B_R)}$, *где* B_R *- это шар радиуса* R *в* E. *Тогда* $\|f_\rho - f_H\|^2 \leq (1/R)^{2r/s-r} \|B^{-r} f_\rho\|^{2s/s-r}$.

В этой записи $\|\cdot\|$ означает норму в пространстве интегрируемых с квадратом на множестве X функций с мерой ρ_X.

Задачу оценки ошибки обобщения можно рассматривать и в другой форме, отличной от (1.5). Для этого представим действительный оптимум в виде:

$$f_H = \underset{H}{min} \{ \underset{X}{max} (f - f_\rho)^2 \}, \tag{1.8}$$

а эмпирический оптимум в виде:

$$f_z = \underset{H}{min} \{ \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (f(x_i) - y_i) \}. \tag{1.9}$$

Далее, вместо оценки ошибки обобщения в форме (1.8) можно исследовать выражение

$$\max_X (f_z - f_p)^2. \tag{1.10}$$

Тогда ошибка выборки будет иметь вид:

$$S'(z,H) = \max_X \{(f_z - f_H)((f_z + f_H) - 2f_p)\}, \tag{1.11}$$

а ошибка аппроксимации (с учетом выражения (1.7))

$$A'(H) = \max_X (\min_H \{\max_X (f - f_p)^2\} - f_p)^2. \tag{1.12}$$

Подставив (1.7) и (1.8) в (1.11), мы получим:

$$S'(z,H) = \max_X \Bigg\{ \min_H (\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(f(x_i) - y_i)^2 - \max_X (f - f_p)^2) \times$$

$$\times [\min_H (\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(f(x_i) - y_i)^2 + \max_X (f - f_p)^2) - f_p] \Bigg\}. \tag{1.13}$$

Список литературы

1. Н. В. Зубов, А. Ф. Зубова. Безопасность функционирования технических систем. Уч. пос. СПб.: Изд-во СПбГУ, 2009, 343 с.

2. А. В. Зубов, Н. В. Зубов. Теория устойчивости и применение к задачам численного анализа. Уч. пос. СПб.: Изд-во НИИ Химии СПбГУ, 2010, 102 с.

3. А. В. Зубов, Н. В. Зубов, А. Ф. Зубова, О. В. Мутлу, М. В. Стрекопытова. Расчет устойчивости решений дифференциальных уравнений второго порядка с приложениями. Уч. пос. СПб.: СПбГУ, 1999, 184 с.

4. Н. В. Зубов, О. В. Мутлу. Методы исследования феноменологических уравнений нейродинамики. Уч. пос. СПб.: "Мобильность-плюс", 2007, 92 с.

5. Н. В. Зубов, С. В. Зубов. Лекции по математическим методам стабилизации динамических систем. СПб.: Изд-во СПбГУ, 2007, 352 с.

6. С. В. Зубов. Исследование устойчивости расчетных движений.СПб.: Мобильность плюс, 2007, 158 с.

Дата поступления 27.08.2009

Modulating of own leaning systems

© **O. A. Zubova**[2]

Abstract. Observation learning, or learning across examples, is concern for systems, that is train, but not programming, on same set examples, that is on a number of pairs enter/exit data. The systems, that be able to learning on examples execution that concrete task, is have many applications in different region modern life.

Key Words: classification, space, learning, a number of, algorithm, relation.

References

1. N. V. Zubov, A. F. Zubova. The safety of function mechanical systems. The school book. SPb.: Published in SPbGU, 2009, 343 p.

2. A. V. Zubov, N. V. Zubov. The theory of stability and application by tasks number analysis. The school book. SPb.: Published NII of Chemistry SPbGU, 2002, 119 p.

3. A. V. Zubov, N. V. Zubov, A. F. Zubova, O. V. Mutlu, M. V. Strecopitova. Calculation of stability of solutions differential equations second order with applications. The school book. SPb.: SPbGU, 1999, 184 p.

4. N. V. Zubov. O. V. Mutlu. The methods of investigation fenomenological equations neirodynamics. The school book. SPb.: "Mobility-plus", 2007, 92 p.

5. N. V. Zubov, S. V. Zubov. The lecture on mathematical methods of stabilizations dynamics systems. SPb.: Published SPbGU, 2007, 352 p.

6. S. V. Zubov. The investigation of stability of calculate motions. SPb.: Mobility-plus, 2007, 158 p.

[2]Assistant of faculty Applied Mathematics - Process Control SPbGU, Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg, a_v_zubov@mail.ru.