Машинное обучение
часть 1

А.М.Миронов

Московский Государственный Университет
Механико-математический факультет
Кафедра математической теории интеллектуальных систем

Введение

Книга представляет собой введение в основные понятия, методы и алгоритмы машинного обучения, которое находится в настоящее время в состоянии исключительно бурного развития и является теоретической основой для проектирования интеллектуальных систем обработки больших данных.

В первой части книги излагаются элементарные аспекты машинного обучения:

- виды задач и моделей машинного обучения,
- простейшие алгоритмы обучения для линейно разделимых обучающих выборок,
- методы градиентного спуска и его разновидности,
- метод обучения нейронных сетей,
- метод опорных векторов,
- ядерные методы машинного обучения,
- регрессионный анализ,
- метрические и вероятностные модели машинного обучения.

Во второй части будут рассмотрены более глубокие вопросы машинного обучения, в частности, методы прогнозирования индивидуальных последовательностей, сравнительная теория машинного обучения, бустинг, алгоритмы экспоненциального смешивания, агрегирующие алгоритмы, методы теории игр в машинном обучении. В третьей части будут изложены модели и методы автоматного и процессного обучения (automata learning и process mining).

Просьба сообщать автору о всех замеченных недостатках и рекомендациях по улучшению данного текста по адресу `amironov66@gmail.com`

Оглавление

Глава 1

Задачи и модели машинного обучения

1.1 Задачи машинного обучения

1.1.1 Предмет машинного обучения

Машинное обучение (Machine Learning, ML) – это раздел теории искусственного интеллекта, предметом которого является поиск методов решения задач путем обучения в процессе решения сходных задач.

Для построения таких методов используются средства алгебры, математической статистики, дискретной математики, теории оптимизации, численных методов, и других разделов математики.

1.1.2 Обучение функциональным зависимостям

Одно из направлений ML связано с задачами следующего вида: имеются

- множество X **объектов**, и
- множество Y **ответов**.

Предполагается, что существует функциональная зависимость

$$f : X \to Y$$

между объектами и ответами, но она неизвестна. Известна лишь совокупность S пар вида (объект, ответ), называемая **обучающей выборкой (training sample)**:

$$S = \{(x_i, y_{x_i} = f(x_i)) \in X \times Y \mid i = 1, \ldots, l\}.$$

Требуется найти приближенный вид этой f путем построения **аппроксимирующей функции (АФ)** $a_S : X \to Y$ (**decision function**), такой, что

$$\forall\, x \in X \quad a_S(x) \approx f(x).$$

1.1.3 Способ описания объектов

Объекты в ML могут иметь самую различную природу: это могут быть люди, животные, растения, страны, организации, сайты, столы, стулья, изображения, фильмы, и т.д.

Один из способов описания объектов в форме, пригодной для решения описанных выше задач ML имеет следующий вид:

- задается множество $\mathfrak{F}$ **признаков объектов (features)**,
- каждому признаку $i \in \mathfrak{F}$ сопоставляется множество D_i **значений** этого признака, и
- каждому объекту $x \in X$ и каждому признаку $i \in \mathfrak{F}$ сопоставляется **значение** x^i i–го признака на объекте x.

Множество признаков объектов определяется решаемыми задачами ML. Адекватный выбор этого множества для каждой конкретной задачи ML – нетривиальная проблема, от правильного решения которой существенно зависит успех в решении этой задачи ML.

Каждый признак $i \in \mathfrak{F}$ имеет определенный **тип**. Ниже мы перечисляем некоторые из таких типов и указываем соответствующие им множества значений D_i:

- **бинарный**: $D_i = \{-1, 1\}$ или $\{0, 1\}$,
- **номинальный**: D_i – конечное множество,
- **порядковый**: D_i – конечное линейно упорядоченное множество,
- **количественный**: $D_i = \mathbf{R}$ (множество действительных чисел).

Для удобства мы будем предполагать, что

- множество $\mathfrak{F}$ признаков является конечным, его элементам сопоставлены натуральные числа $1, \ldots, n$, которые мы будем отождествлять с соответствующими им признаками, и
- значениями каждого признака являются действительные числа.

Описание объекта $x \in X$ относительно множества $\{1, \ldots, n\}$ признаков – это кортеж $(x^1, \ldots, x^n)$ значений каждого из признаков $1, \ldots, n$. Т.к. по предположению $\forall\, i = 1, \ldots, n \quad x^i \in \mathbf{R}$, то описание объекта x можно рассматривать как элемент векторного пространства $\mathbf{R}^n$.

Напомним, что $\mathbf{R}^n$ состоит из всех **векторов размерности** n, т.е. последовательностей вида $(\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$, где $\forall\, i = 1, \ldots, n\ \alpha_i \in \mathbf{R}$, операции сложения на данных последовательностях и умножения их на действительные числа определяются стандартным образом:

$$(\alpha_1, \ldots, \alpha_n) + (\alpha'_1, \ldots, \alpha'_n) \stackrel{\text{def}}{=} (\alpha_1 + \alpha'_1, \ldots, \alpha_n + \alpha'_n),$$
$$\alpha(\alpha_1, \ldots, \alpha_n) = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n)\alpha \stackrel{\text{def}}{=} (\alpha\alpha_1, \ldots, \alpha\alpha_n).$$

1.1.4 Пример задачи машинного обучения

В этом пункте мы приведем пример одной задачи ML и связанного с ней описания объектов. Данная задача называется **задачей кредитного скоринга**. Объектами в ней являются заявки на выдачу кредита в некотором банке, а ответами – элементы множеста $\{-1, 1\}$. Для каждого объекта x ответ $f(x)$ интепретируется как решение банка:

- ответ «1»: выдать кредит по заявке x,
- ответ «-1»: отказать в удовлетворении заявки x.

Решение банка по удовлетворению заявки является правильным, если

- клиент, подавший эту заявку, и получивший кредит, вернет его в должный срок, или
- клиент, которому было отказано в удовлетворении заявки x, в случае получения этого кредита с высокой вероятностью может не вернуть его в должный срок.

Известно множество $S = \{(x_i, y_{x_i}) \mid i = 1, \ldots l\}$ где $\forall\, i = 1, \ldots l$

- x_i – некоторая заявка на выдачу кредита,
- y_{x_i} – решение банка по этой заявке, которое является правильным.

Требуется обучиться функции a_S, вычисляющей по каждой новой заявке правильное решение. Данную задачу можно решать методами ML, в которой S рассматривается как обучающая выборка.

Каждый объект в этой задаче связан с некоторым клиентом, и признаки объекта могут иметь вид различных характеристик этого клиента. Например, могут быть выбраны следующие признаки:

- бинарные: пол, наличие постоянной работы, и т.д.
- номинальные: место проживания, профессия, работодатель и т.д.
- порядковые: образование, должность и т.д.
- количественные: возраст, зарплата, стаж работы, доход семьи, сумма кредита и т.д.

Описанная выше задача ML может допускать различные обобщения. Например, можно обучаться не только нахождению правильных решений банка, но и например оценке вероятности дефолта клиента (т.е. возникновения ситуации, когда клиент, получивший кредит, не вернет его в должный срок).

1.1.5 Виды задач машинного обучения

Задачи классификации

Изложенная в предыдущем пункте задача ML является примером задач **классификации**. В задачах данного вида

- множество ответов Y является конечным,
- каждый ответ $y \in Y$ соответствует некоторому классу объектов, и
- задача ML заключается в вычислении по каждому объекту соответствующего ему класса.

В описанной в предыдущем пункте задаче рассматривается классификация с двумя классами объектов. Другой пример задач классификации с двумя классами: объектами являются посетители поликлиники, требуется по признакам посетителя дать ответ: болен он, или нет.

Могут быть задачи классификации с числом классов более двух, например

- задача распознавания рукописных букв русского языка, в данном случае $Y = \{\text{а}, \ldots, \text{я}\}$,
- пусть M – некоторое множество болезней, X – множество пациентов поликлиники, для которых требуется диагностировать набор болезней, которыми они болеют, в данном случае классы соответствуют наборам болезней: $Y = \mathcal{P}(M)$.

Задачи регрессии

В задачах регрессии множество ответов Y имеет вид $\mathbf{R}$ или $\mathbf{R}^m$. Задачи данного типа как правило связаны с прогнозированием (например, курса доллара, или курсов нескольких валют).

Задачи ранжирования

Задачи ранжирования возникают например в системах информационного поиска, или в рекомендательных системах. В данных задачах требуется по каждому объекту $x \in X$ определить его приоритет в выдаче в качестве результата на некоторый запрос. Множество Y ответов здесь является конечным упорядоченным множеством, $\forall\, x \in X$ значение $f(x)$ представляет собой соответствующий приоритет.

1.2 Модели машинного обучения

1.2.1 Понятие модели обучения

Как правило, для решения задачи построения функции $a_S : X \to Y$ по обучающей выборке S выбирается некоторая **модель обучения**, состоящая из двух компонентов:

1. Первой компонентой модели обучения является функция

$$a : X \times W \to Y \tag{1.1}$$

   где W – множество, элементы которого называются **параметрами**.

   Искомая функция a_S ищется в виде

$$a_S(x) = a(x, w), \tag{1.2}$$

   где w – фиксированный параметр. Функцию (1.1) иногда называют **предсказательной моделью** (**predictive model**).

2. Другой компонентой модели обучения является **алгоритм обучения**, который представляет собой алгоритм поиска такого значения w, для которого функция a_S, определяемая соотношением (1.2), обладает некоторыми свойствами оптимальности. Более подробно об свойствах оптимальности функции a_S см. в пункте 1.2.3.

1.2.2 Примеры предсказательных моделей

Линейная предсказательная модель

В **линейной предсказательной модели** множество W параметров имеет вид $\mathbf{R}^n$, где n – число признаков объектов, т.е. каждый параметр w представляет собой вектор действительных чисел $w = (w_1, \ldots, w_n)$, и

- в задачах регресии и ранжирования $Y = \mathbf{R}$, и

$$a(x, w) = \langle x, w \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{n} x^i w_i$$

  (число $\langle x, w \rangle$ называется **скалярным произведением** x и w),

- в задачах классификации $Y = \{-1, 1\}$, и

$$a(x, w) = sign(\langle x, w \rangle),$$

  где $sign$ – **функция знака**, она сопоставляет неотрицательным числам значение 1, а отрицательным – значение -1.

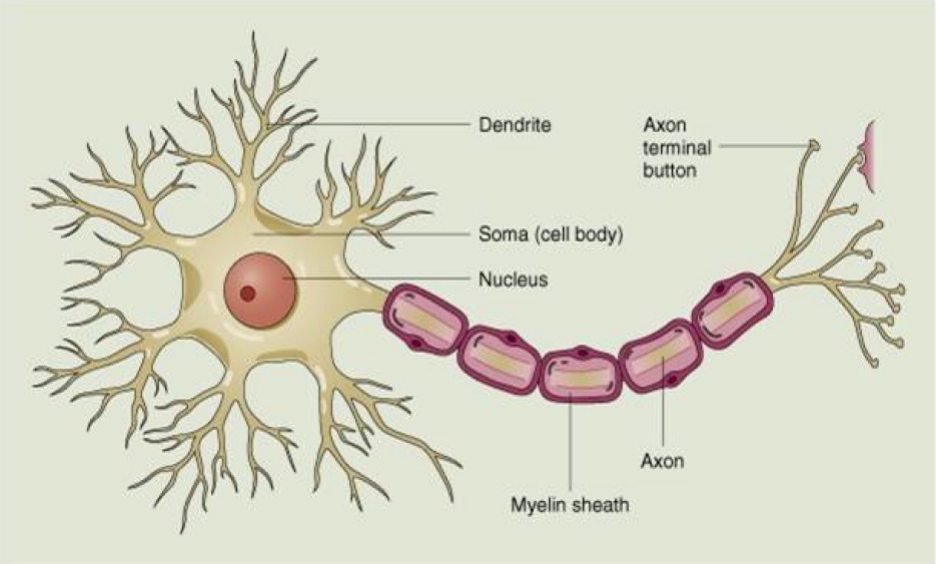
Если какая-либо задача ML не решается в некоторой линейной модели, то для решения этой задачи можно попытаться расширить исходную линейную модель путем добавления новых признаков, получаемых из уже имеющихся признаков. Например, можно добавлять

- комбинации признаков (их произведение, и т.п.),
- функции от признаков, и т.д.

Предсказательная модель в виде нейронной сети

В современных технологиях машинного обучения очень популярны предсказательные модели, основанные на нейронных сетях.

Данные модели используют преобразователи информации, являющиеся аналогами биологических нейронов. Структура биологического нейрона изображена на следующей картинке:



Преобразование информации в нейроне происходит в его центральной части (называемой **телом**), от которой отходят отростки двух типов:

- **дендриты**, по ним поступают входные сигналы, будем считать дендриты занумерованными натуральными числами $1, \ldots, n$,
- **аксон**, отросток такого типа ровно один, по нему проходит выходной сигнал.

Схема работы нейрона имеет следующий вид: с каждым из дендритов связано некоторое неотрицательное действительное число, называемое **весовым коэффициентом** (или просто **весом**). Обозначим записью $w_1, \ldots, w_n$ список весов, соответствующих каждому из дендритов ($\forall\, i = 1, \ldots, n$ дендриту номер i соответствует вес w_i). Кроме того, с нейроном связано число $w_0 \geq 0$, называемое **порогом возбуждения**.

Сигналы, поступаемые в нейрон по дендритам, являются электрическими импульсами различной интенсивности. Обозначим записью x^1, …, x^n список интенсивностей сигналов, поступивших в текущий момент по каждому из дендритов ($\forall\, i = 1, \ldots, n$ x^i – интенсивность сигнала, поступившего на нейрон номер i). Данные сигналы вызывают в центральной части нейрона электрический импульс интенсивности $\sum\limits_{i=1}^{n} x^i w_i$, и

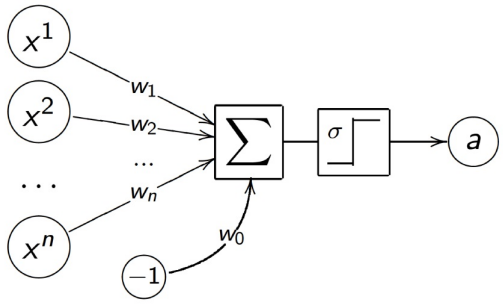
- если интенсивность этого импульса превышает порог возбуждения нейрона w_0, то нейрон выпускает по аксону выходной сигнал некоторой интенсивности,

- иначе по аксону выходной сигнал не выпускается (мы будем считать, что в этом случае по аксону выпускается выходной сигнал нулевой интенсивности).

Нейрон можно рассматривать как преобразователь числовой информации: на его вход поступает кортеж действительных чисел $(x^1, \ldots, x^n)$, на выход он выдает число a, определяемое соотношением

$$a = \sigma\Big(\sum_{i=1}^{n} x^i w_i - w_0\Big)$$

где σ – функция (называемая **функцией активации**), сопоставляющая неотрицательным числам значение 1, и отрицательным числам – значение 0. Функционирование нейрона изображается диаграммой



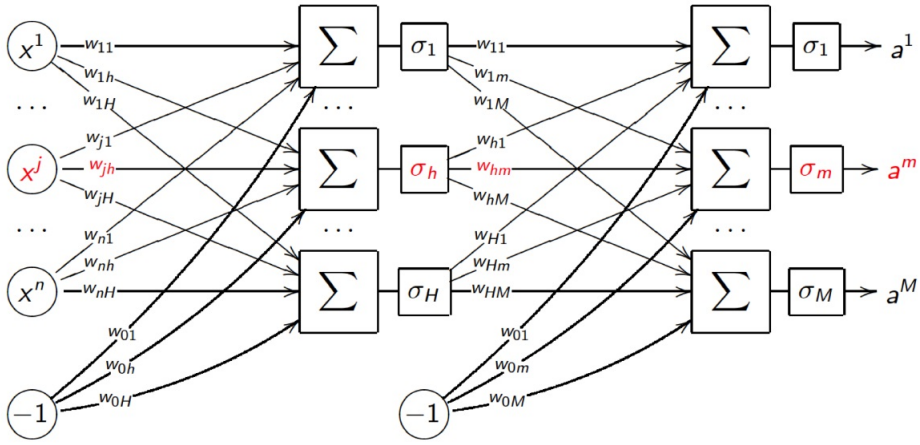
Ниже мы будем называть нейронами не только биологические нейроны, но также и произвольные преобразователи числовой информации, работающие по описанному выше принципу.

Функция активации (σ) в нейронах может иметь не только описанный выше вид, но также и другой вид, например:

- **сигмоида**: $\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$, или $\mathrm{th}(x)$,
- **ReLU**: $\sigma(x) = 0$ при $x < 0$, и $\sigma(x) = x$ при $x \geq 0$.

Нейроны можно объединять в более сложные преобразователи числовой информации, называемые **многослойными нейронными сетями**. В этих сетях сигналы, выдаваемые на выходах одних нейронов поступают на входы других нейронов. При этом допускается, что один и тот же сигнал с выхода какого-либо нейрона может параллельно подаваться на входы нескольких нейронов.

Приводимая ниже диаграмма является схематическим изображением двуслойной нейронной сети:



Понятие многослойной нейронной сети является основой для методов **глубокого обучения (deep learning)**, которые являются предметом большого количества теоретических и прикладных исследований и коммерческих разработок, но в данном курсе рассматриваться не будут.

1.2.3 Алгоритмы обучения

Алгоритм обучения (learning algorithm) представляет собой алгоритм нахождения по обучающей выборке S такой АФ $a_S : X \to Y$, которая обладает описываемыми ниже **свойствами оптимальности**. Все эти свойства оптимальности являются детализацией следующего требования: a_S должно как можно лучше приближать исходную неизвестную функцию $f : X \to Y$ на всем X.

Для точного описания свойств оптимальности алгоритмов обучения используется понятие **функции потерь (loss function)**, которая сопоставляет паре (a_S, x), где $x \in X$, число $\mathcal{L}(a_S, x)$, выражающее величину ошибки аппроксимации a_S на объекте $x \in X$.

Приведем некоторые примеры функций потерь.

- $\mathcal{L}(a_S, x) = [\![a_S(x) \neq f(x)]\!]$ (для задач классификации), где для каждого утверждения β запись $[\![\beta]\!]$ обозначает
  - значение 1, если утверждение β истинно, и
  - значение 0, если утверждение β ложно,
- $\mathcal{L}(a_S, x) = |a_S(x) - f(x)|$ или $(a_S(x) - f(x))^2$ (для задач регрессии).
- Пусть a_S имеет вид $sign(\langle x, w \rangle)$.

Обозначим записью $M_x(w)$ число $\langle x, w\rangle f(x)$ (эта величина называется отступом (margin)). $\mathcal{L}(a_S, x)$ может иметь вид

$$[\![M_x(w) < 0]\!],\ (1 - M_x(w))^2,\ e^{-M_x(w)},\ \frac{2}{1 + e^{M_x(w)}},\ \log_2(1 + e^{-M_x(w)}).$$

Если $S' = \{(x'_i, y'_i) \mid i = 1, \ldots, l'\}$ – какая-либо обучающая выборка, соответствующая той же исходной функции $f : X \to Y$, что и S, то запись $\mathcal{L}(a_S, S')$ обозначает число

$$\frac{1}{l'} \sum_{i=1}^{l'} \mathcal{L}(a_S, x'_i).$$

В описаниях свойств оптимальности алгоритмов обучения используется понятие **функционала эмпирического риска** (называемого ниже просто **риском**) аппроксимации a_S, который определяется как число

$$Q(a_S) = \mathcal{L}(a_S, S).$$

Если a_S имеет вид $a(x, w)$, где $a : X \times W \to Y$ и $w \in W$ (т.е. риск $Q(a_S)$ является функцией от w), то одно из свойств оптимальности алгоритма обучения по обучающей выборке S имеет следующий вид: значение параметра $w \in W$, определяющее наилучшую аппроксимацию a_S, должно удовлетворять соотношению

$$w = \arg\min_{w \in W} Q(a_S) \tag{1.3}$$

т.е. решение задачи ML сводится к оптимизационной задаче: требуется найти такой параметр $w \in W$, который минимизирует риск $Q(a_S)$.

Данная задача лучше всего решается в том случае, когда функция $\mathcal{L}(a(x, w), x)$ является дифференцируемой по w, т.к. в этом случае функция $Q(a_S)$ тоже является дифференцируемой по w, и для ее оптимизации можно применять простые методы: находить минимумы с помощью приравнивания к нулю частных производных, использовать методы градиентного спуска, и т.п.

Если $\mathcal{L}$ разрывна, то для решения задачи оптимизации $Q(a(x, w))$ лучше всего аппроксимировать $\mathcal{L}$ сверху какой-либо непрерывной функцией $\tilde{\mathcal{L}} \geq \mathcal{L}$, и использовать в выражении $Q(a(x, w))$ функцию $\tilde{\mathcal{L}}$ вместо функции $\mathcal{L}$.

1.3 Проблема переобучения

Переобучение – это чрезмерно точная подгонка АФ a_S под обучающую выборку S, которая дает сильные отклонения значений $a_S(x)$ от правильных значений (т.е. от $f(x)$) для многих объектов x, не входящих в обучающую выборку S.

Причины возникновения переобучения:

- излишние степени свободы в предсказательной модели $a(x, w)$, приводящие к учету при построении a_S различных шумов, неточностей и ошибок в данных,
- неполнота обучающей выборки S.

Переобучение можно обнаружить следующими способами.

1. **Скользящий контроль (LOO, leave-one-out)**.

   Пусть задана обучающая выборка $S = \{(x_i, y_{x_i}) \mid i = 1, \ldots, l\}$.

   $\forall\, i = 1, \ldots, l$ обозначим записью $S - i$ выборку

   $$\{(x_i, y_{x_i}) \mid i = 1, \ldots, i-1, i+1, \ldots, l\}.$$

   Признаком переобучения является высокое значение выражения

   $$\frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} \mathcal{L}(a_{S-i}, x_i)$$

   Данный способ контроля переобучения можно представить в виде одного из условий оптимальности алгоритма обучения: данное условие имеет вид

   $$\frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} \mathcal{L}(a_{S-i}, x_i) \to \min$$

2. **Кросс-проверка (cross-validation)**.

   Делается разбиение выборки на две части S_1 и S_2, обучение идет по S_1, а S_2 используется для проверки качества обучения.

   Признаком переобучения является высокое значение выражения

   $$Q(a_{S_1}, S_2).$$

Данный способ контроля переобучения тоже можно представить в виде одного из условий оптимальности алгоритма обучения: выбирается N различных разбиений обучающей выборки S на две части

$$\left(S_1^{(1)}, S_2^{(1)}\right), \ldots, \left(S_1^{(N)}, S_2^{(N)}\right),$$

и одно из условий оптимальности алгоритма обучения имеет вид

$$\sum_{i=1}^{N} Q(a_{S_1^{(i)}}, S_2^{(i)}) \to \min$$

1.4 Основные этапы решения задач машинного обучения

Решение каждой задачи машинного обучения состоит из следующих основных этапов:

- адекватное понимание задачи и данных,
- предобработка данных и изобретение признаков и множеств значений каждого из этих признаков,
- построение предсказательной модели $a(x, w)$,
- сведение обучения к оптимизации,
- решение проблем оптимизации и переобучения,
- оценивание качества,
- внедрение и эксплуатация.

Глава 2

Элементарные методы и алгоритмы машинного обучения

2.1 Линейно разделимые выборки

Во многих задачах ML

- множества объектов и ответов имеют вид $X = \mathbf{R}^n$, $Y = \{-1, 1\}$, и
- задача обучения заключается в нахождении по выборке S АФ a_S вида

$$a_S(x) = sign\Big(\sum_{i=1}^{n} x^i w_i - w_0\Big), \quad \text{где } w_1, \ldots, w_n, w_0 \in \mathbf{R}, \tag{2.1}$$

  которая минимизирует риск $Q(a_S)$.

В некоторых случаях задача нахождения функции a_S вида (2.1) имеет наилучшее решение: можно найти такие значения $w_1, \ldots, w_n, w_0$, для которых $Q(a_S) = 0$.

Из определения $Q(a_S)$ следует, что равенство $Q(a_S) = 0$ равносильно свойству $\forall\,(x, y) \in S \;\; a_S(x) = y$, т.е. если функция a_S имеет вид (2.1), то

$$\forall\,((x^1, \ldots, x^n), y) \in S \quad sign\Big(\sum_{i=1}^{n} x^i w_i - w_0\Big) = y. \tag{2.2}$$

Выборка S, для которой существуют числа $w_1, \ldots, w_n, w_0 \in \mathbf{R}$, удовлетворяющие условию (2.2), называется **линейно разделимой**.

Условие (2.2) можно переписать в виде: $\forall\,((x^1, \ldots, x^n), y) \in S$

$$\Big(\sum_{i=1}^{n} x^i w_i - w_0\Big) y \geq 0. \tag{2.3}$$

Если $\exists\, w_1, \ldots, w_n, w_0 \in \mathbf{R}$: $\forall\, ((x^1, \ldots, x^n), y) \in S$ неравенство (2.3) строгое, то выборка S называется **строго линейно разделимой**.

Понятие строгой линейной разделимости имеет геометрическую интерпретацию: если выборка $S \subseteq \mathbf{R}^n \times \{-1, 1\}$ строго разделима, т.е. $\exists\, w_1, \ldots, w_n, w_0 \in \mathbf{R}$: $\forall\, ((x^1, \ldots, x^n), y) \in S$

$$\Big(\sum_{i=1}^{n} x^i w_i - w_0\Big) y > 0, \tag{2.4}$$

то гиперплоскость P, определяемая уравнением $\sum\limits_{i=1}^{n} x^i w_i - w_0 = 0$, разделяет множества

$$S^+ \stackrel{\text{def}}{=} \{x \in \mathbf{R}^n \mid (x, 1) \in S\} \quad \text{и} \quad S^- \stackrel{\text{def}}{=} \{x \in \mathbf{R}^n \mid (x, -1) \in S\} \tag{2.5}$$

т.е. S^+ и S^- содержатся в разных полупространствах, на которые P делит пространство $\mathbf{R}^n$. Верно и обратное: если для выборки S можно найти гиперплоскость P, такую, что множества (2.5) содержатся в разных полупространствах, на которые P делит пространство $\mathbf{R}^n$, то S строго линейно разделима.

Напомним, что $\forall\, X \subseteq \mathbf{R}^n$

- множество X называется **выпуклым**, если $\forall\, x, x' \in X$

  $$\{\alpha x + (1 - \alpha) x' \mid \alpha \in [0, 1]\} \subseteq X, \tag{2.6}$$

  множество в левой части (2.6) называется **отрезком**, соединяющим точки x и x', и обозначается записью $[xx']$,

- **выпуклой оболочкой** $Conv(X)$ множества X называется наименьшее (по включению) выпуклое множество, содержащее X,

- $Conv(X)$ совпадает с пересечением совокупности всех выпуклых подмножеств $\mathbf{R}^n$, содержащих X,

- если X – конечное множество и имеет вид $\{x_1, \ldots, x_n\}$, то

  $$Conv(X) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i x_i, \text{ где } \forall\, i = 1, \ldots, n \quad \alpha_i \in \mathbf{R}, \alpha_i \geq 0, \sum_{i=1}^{n} \alpha_i = 1,$$

  и, кроме того, $Conv(X)$ – компактное множество (т.к. оно замкнуто и ограничено).

$\forall\, x, x' \in \mathbf{R}^n$ запись $|xx'|$ обозначает длину отрезка $[xx']$, которую мы понимаем как евклидову норму $\|x - x'\|$ вектора $x - x'$.

Теорема 1.

Конечная выборка $S \subseteq \mathbf{R}^n \times \{-1, 1\}$ строго линейно разделима тогда и только тогда, когда

$$Conv(S^+) \cap Conv(S^-) = \emptyset. \tag{2.7}$$

Доказательство.

Пусть выборка S строго линейно разделима, т.е. существует гиперплоскость P, разделяющая S^+ и S^-. Обозначим записями Z_1, Z_2 полупространства, на которые P делит $\mathbf{R}^n$, и записями $\overset{\circ}{Z}_1, \overset{\circ}{Z}_2$ – внутренние части этих полупространств, т.е. $\overset{\circ}{Z}_i = Z_i \setminus P$ $(i = 1, 2)$. Строгая разделимость множеств S^+ и S^- гиперплоскостью P выражается утверждением

$$S^+ \subseteq \overset{\circ}{Z}_1, \quad S^- \subseteq \overset{\circ}{Z}_2\,. \tag{2.8}$$

Нетрудно доказать, что множества $\overset{\circ}{Z}_1$ и $\overset{\circ}{Z}_2$ выпуклы, поэтому из (2.8) и из определения выпуклой оболочки следует, что

$$Conv(S^+) \subseteq \overset{\circ}{Z}_1, \quad Conv(S^-) \subseteq \overset{\circ}{Z}_2\,. \tag{2.9}$$

Поскольку $\overset{\circ}{Z}_1 \cap \overset{\circ}{Z}_2 = \emptyset$, то из (2.9) следует (2.7).

Докажем обратную импликацию. Предположим, что верно (2.7).

Поскольку множество S конечно, то S^+ и S^- тоже конечны. Как было отмечено выше, в этом случае множества $Conv(S^+)$ и $Conv(S^-)$ компактны. Следовательно, множество

$$D_S \stackrel{\text{def}}{=} Conv(S^+) \times Conv(S^-)$$

тоже компактно.

Обозначим символом ρ функцию вида $D_S \to \mathbf{R}$, которая сопоставляет паре точек $(x, y) \in D_S$ длину $|xy|$ отрезка, соединяющего эти точки. Функция ρ непрерывна, и ее область определения – компакт, поэтому ρ принимает наименьшее значение в некоторой точке $(x^+, x^-) \in D_S$. Если бы $\rho(x^+, x^-)$ было равно 0, т.е. $x^+ = x^-$, то это бы противоречило предположению (2.7). Следовательно, $\rho(x^+, x^-) > 0$.

Обозначим записями P_{S^+} и P_{S^-} гиперплоскости, проходящие через x^+ и x^- соответственно, и ортогональные отрезку $[x^+, x^-]$. Гиперплоскости P_{S^+} и P_{S^-} параллельны и разбивают $\mathbf{R}^n$ на три множества:

- два полупространства (обозначим их записями Z_{S^+} и Z_{S^-}), и
- полосу (P_{S^+}, P_{S^-}) между этими полупространствами (не содержащую точек из P_{S^+} и P_{S^-}).

Нетрудно видеть, что

$$Z_{S^+} = \{x \in \mathbf{R}^n \mid x = x^+ \text{ или } \widehat{xx^+x^-} \geq \tfrac{\pi}{2}\}$$

и аналогичное свойство верно для Z_{S^-}.

Докажем, что $S^+ \subseteq Z_{S^+}$, т.е. $\forall\, x \in S^+ \setminus \{x^+\}$ $\widehat{xx^+x^-} \geq \frac{\pi}{2}$. Если бы это было неверно, т.е. $\widehat{xx^+x^-} < \frac{\pi}{2}$, то на отрезке $[x^+x]$ была бы точка x', такая, что $|x'x^-| < |x^+x^-|$. Т.к. $[x^+x] \subseteq Conv(S^+)$, то $x' \in Conv(S^+)$. Таким образом, $(x', x^-) \in D_S$ и $\rho(x', x^-) < \rho(x^+, x^-)$. Это противоречит тому, что ρ принимает наименьшее значение на паре (x^+, x^-).

Аналогично доказывается включение $S^- \subseteq Z_{S^-}$.

Из доказанного выше следует, что $(S^+ \cup S^-) \cap (P_{S^+}, P_{S^-}) = \emptyset$.

В качестве гиперплоскости, строго разделяющей S^+ и S^-, можно взять, например, гиперплоскость P, проходящую через любую внутреннюю точку отрезка $[x^+x^-]$ и ортогональную этому отрезку (т.е. P будет параллельна P_{S^+} и P_{S^-}). Поскольку

- $P \subseteq (P_{S^+}, P_{S^-})$, и
- полупространства Z_{S^+} и Z_{S^-} содержатся в разных полупространствах, на которые P делит $\mathbf{R}^n$,

то, следовательно, S^+ и S^- содержатся в разных полупространствах, на которые P делит $\mathbf{R}^n$. ■

Для задачи классификации в случае строго разделимой выборки S существует алгоритм нахождения функции a_S вида (2.1) со свойством $Q(a_S) = 0$, который называется **алгоритмом обучения Розенблатта** и излагается в следующем параграфе.

2.2 Алгоритм обучения Розенблатта

В этом параграфе рассматривается задача классификации, в которой

- множества объектов и ответов имеют вид $X = \mathbf{R}^n$, $Y = \{-1, 1\}$, и

- задача обучения заключается в нахождении по выборке S АФ a_S вида

$$a_S(x) = sign\Big(\sum_{i=1}^{n} x^i w_i - w_0\Big), \quad \text{где } w_1, \ldots, w_n, w_0 \in \mathbf{R}, \tag{2.10}$$

которая минимизирует риск $Q(a_S)$.

2.2.1 Описание алгоритма обучения Розенблатта

Пусть выборка S строго линейно разделима, т.е. $\exists\, w_1, \ldots, w_n, w_0 \in \mathbf{R}$:

$$\forall\,(x, y) \in S \quad \Big(\sum_{i=1}^{n} x^i w_i - w_0\Big) y > 0, \quad \text{где } (x^1, \ldots, x^n) = x. \tag{2.11}$$

Нетрудно видеть, что неравенство в (2.11) равносильно неравенству

$$\langle (x^1, \ldots, x^n, -1), (w_1, \ldots, w_n, w_0) \rangle y > 0,$$

поэтому задача нахождения для строго разделимой выборки S такого вектора $(w_1, \ldots, w_n, w_0)$, который удовлетворяет условию (2.11), сводится к задаче нахождения вектора $w \in \mathbf{R}^{n+1}$, такого, что

$$\forall\,(x, y) \in S \quad \langle (x, -1), w \rangle y > 0,$$

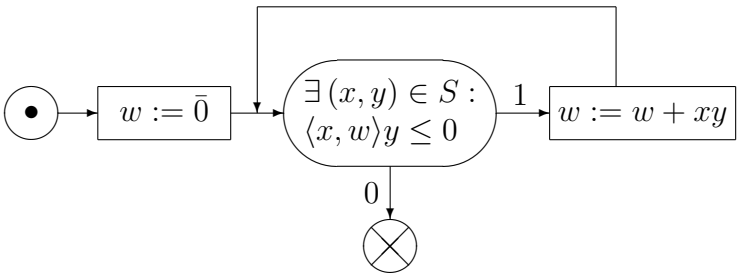
где $(x, -1) \in \mathbf{R}^{n+1}$ получается из x добавлением компоненты, равной -1.

Таким образом, задача нахождения для строго разделимой выборки АФ a_S со свойством $Q(a_S) = 0$ сводится к следующей задаче: пусть выборка S такова, что существует вектор w, обладающий свойством

$$\forall\,(x, y) \in S \quad \langle x, w \rangle y > 0. \tag{2.12}$$

Требуется найти хотя бы один вектор w, обладающий свойством (2.12).

Для поиска такого вектора w можно использовать излагаемый ниже алгоритм, называемый **алгоритмом Розенблатта** [5]. Данный алгоритм можно представить в виде следующей блок-схемы:



(2.13)

где $\bar{0}$ – вектор, компоненты которого равны 0, и x, y в правом прямоугольнике – компоненты какой-либо пары $(x, y) \in S$, такой, что $\langle x, w\rangle y \leq 0$.

Нетрудно видеть, что после завершения работы данного алгоритма значение переменной w будет обладать свойством (2.12).

2.2.2 Завершаемость алгоритма Розенблатта

Завершаемость алгоритма Розенблатта обосновывается нижеследующей теоремой, которая называется **теоремой Новико́ва**.

Теорема 2 (A.Novikoff, 1962) [6], [7].

Пусть конечная выборка $S \subset \mathbf{R}^n \times \{-1, 1\}$ такова, что свойство (2.12) выполняется для некоторого вектора $\hat{w}$, т.е.

$$\forall\, (x, y) \in S \quad \langle x, \hat{w}\rangle y > 0.$$

Тогда алгоритм Розенблатта, применяемый к выборке S, завершает свою работу после не более чем $(\sigma/\rho)^2$ циклов, где

$$\sigma = \max_{(x,y)\in S} \|x\|, \quad \rho = \frac{1}{\|\hat{w}\|} \min_{(x,y)\in S} \langle x, \hat{w}\rangle y.$$

Доказательство.

В доказательстве данной теоремы используется **неравенство Коши-Буняковского**, которое верно для произвольной пары a, b векторов из линейного пространства со скалярным произведением $\langle\ \rangle$, имеет вид

$$\langle a, b\rangle \leq \|a\|\, \|b\| \tag{2.14}$$

и доказывается следующим образом: $\forall\, t \in \mathbf{R}$

$$\begin{aligned} &0 \leq \|at + b\|^2 = \\ &= \langle at + b, at + b\rangle = \\ &= \langle a, a\rangle t^2 + 2\langle a, b\rangle t + \langle b, b\rangle = \\ &= \|a\|^2 t^2 + 2\langle a, b\rangle t + \|b\|^2. \end{aligned}$$

Соотношение

$$\forall\, t \in \mathbf{R} \quad \|a\|^2 t^2 + 2\langle a, b\rangle t + \|b\|^2 \geq 0 \tag{2.15}$$

равносильно тому, что дискриминант

$$(2\langle a, b\rangle)^2 - 4\|a\|^2\|b\|^2 \tag{2.16}$$

квадратного трехчлена в (2.15) неположителен, т.е.

$$\langle a, b\rangle^2 - \|a\|^2\|b\|^2 \leq 0,$$

откуда следует (2.14).

Обозначим записями $w^{(k-1)}$ и $w^{(k)}$ значения переменной w до и после k–го выполнения цикла в (2.13). Т.к. $w^{(k)} = w^{(k-1)} + xy$, то

$$\begin{array}{l}\langle w^{(k)}, \hat{w}\rangle = \langle w^{(k-1)} + xy, \hat{w}\rangle = \langle w^{(k-1)}, \hat{w}\rangle + \langle x, \hat{w}\rangle y \geq \\ \geq \langle w^{(k-1)}, \hat{w}\rangle + \|\hat{w}\|\rho.\end{array} \tag{2.17}$$

Применяя (2.17) k раз, и учитывая $w^{(0)} = \bar{0}$, получаем:

$$\langle w^{(k)}, \hat{w}\rangle \geq \langle w^{(0)}, \hat{w}\rangle + k\|\hat{w}\|\rho = k\|\hat{w}\|\rho. \tag{2.18}$$

Согласно неравенству Коши-Буняковского, $\langle w^{(k)}, \hat{w}\rangle \leq \|w^{(k)}\|\,\|\hat{w}\|$, поэтому из (2.18) следует, что

$$k\|\hat{w}\|\rho \leq \langle w^{(k)}, \hat{w}\rangle \leq \|w^{(k)}\|\,\|\hat{w}\|,$$

откуда следует неравенство $k\rho \leq \|w^{(k)}\|$, или

$$k^2\rho^2 \leq \|w^{(k)}\|^2. \tag{2.19}$$

С другой стороны,

$$\|w^{(k)}\|^2 = \langle w^{(k-1)} + xy, w^{(k-1)} + xy\rangle = \|w^{(k-1)}\|^2 + 2\langle x, w^{(k-1)}\rangle y + \|x\|^2, \tag{2.20}$$

и поскольку $\langle x, w^{(k-1)}\rangle y \leq 0$ и $\|x\| \leq \sigma$, то из (2.20) следует, что

$$\|w^{(k)}\|^2 \leq \|w^{(k-1)}\|^2 + \|x\|^2 \leq \|w^{(k-1)}\|^2 + \sigma^2. \tag{2.21}$$

Применяя (2.21) k раз, и учитывая $w^{(0)} = \bar{0}$, получаем:

$$\|w^{(k)}\|^2 \leq k\sigma^2. \tag{2.22}$$

Объединяя (2.19) и (2.22) получаем:

$$k^2\rho^2 \leq \|w^{(k)}\|^2 \leq k\sigma^2,$$

откуда следует неравенство $k^2\rho^2 \leq k\sigma^2$, или $k\rho^2 \leq \sigma^2$, или $k \leq (\sigma/\rho)^2$.

Таким образом, число выполнений цикла в блок-схеме (2.13) не превосходит $(\sigma/\rho)^2$. ■

2.2.3 Модификации алгоритма Розенблатта

Для ускорения процесса нахождения искомого вектора w, удовлетворяющего условию (2.12), приведенный выше алгоритм можно модифицировать:

- в качестве начального значения w в (2.13) можно брать не $\bar{0}$, а любой вектор, рекомендуется брать в качестве начального вектор
$$\left(\frac{\langle x^1, y\rangle}{\|x^1\|^2}, \ldots, \frac{\langle x^n, y\rangle}{\|x^n\|^2}\right),$$
где вектора $x^1, \ldots, x^n, y$, определяются следующим образом: если S имеет вид $\{(x_i, y_{x_i}) \mid i = 1, \ldots, l\}$, и $\forall\, i = 1, \ldots, l \;\; x_i = (x_i^1, \ldots, x_i^n)$, то
$$\forall\, j = 1, \ldots, n \;\; x^j = (x_1^j, \ldots, x_l^j), \quad y = (y_{x_1}, \ldots, y_{x_l})$$
(это оптимальный выбор, если $\langle x^i, x^j\rangle$ близко к 0 при $i \neq j$),
- действие $w := w + xy$ можно заменить на $w := w + xy\eta$, где η – фиксированное положительное число.

2.3 Метод градиентного спуска

2.3.1 Понятие градиентного спуска

Как было отмечено в пункте 1.2.3, если задача ML заключается в нахождении по обучающей выборке $S = \{(x_i, y_{x_i}) \mid i = 1, \ldots l\}$ такого параметра w, который минимизирует функцию риска

$$Q(a_S) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} \mathcal{L}(a(x_i, w), x_i), \tag{2.23}$$

то в том случае, когда функция (2.23) дифференцируема по w, для нахождения искомого параметра w можно использовать **метод градиентного спуска**. Данный метод заключается в итеративном построении последовательных приближений к искомому значению параметра w путем небольших изменений этого параметра. Эти изменения выбираются такими, чтобы на каждой итерации новое значение w как можно сильнее уменьшало бы функцию (2.23).

Метод градиентного спуска не всегда обеспечивает нахождение параметра w, минимизирующего функцию (2.23) (параметр с таким свойством называется **глобальным минимумом**). Иногда с помощью этого метода можно найти лишь **локальный минимум**, т.е. такое значение w, которое невозможно улучшить путем небольших изменений.

2.3.2 Описание метода градиентного спуска

Метод градиентного спуска (МГС) предназначен для поиска минимумов дифференцируемых функций нескольких переменных, и заключается в следующем.

Пусть задана дифференцируемая функция Q от n переменных:

$$Q : W \to \mathbf{R}, \quad \text{где } W \subseteq \mathbf{R}^n \text{ – открытое множество.}$$

Для нахождения такого $w \in W$, значение функции Q на котором было бы как можно меньшим, производятся следующие действия:

1. выбирается первое приближение $w^{(0)} \in W$ к искомому значению w,
2. выбирается число $\delta > 0$,
3. среди всех точек, входящих в δ–окрестность точки $w^{(0)}$ выбирается такая точка $w^{(1)} \in W$ (являющаяся следующим приближением к искомому значению w), значение функции Q на которой было бы как можно меньшим, если же значения Q во всех точках δ–окрестности $w^{(0)}$ примерно одинаковы, то работа завершается,
4. предыдущие два действия повторяются, только в качестве $w^{(0)}$ теперь рассматривается точка $w^{(1)}$, в результате выполнения этих действий строится новое приближение $w^{(2)}$, и т.д.

Таким образом, данный алгоритм строит последовательность точек $w^{(0)}$, $w^{(1)}$, …, $w^{(k)}$, $w^{(k+1)}$, …, в которой переход от каждой точки $w^{(k)}$ к следующей точке $w^{(k+1)}$ производится в соответствии с действием 3.

Рассмотрим более подробно вопрос о том, как следует выбрать точку $w^{(k+1)}$ в действии 3, чтобы значение $Q(w^{(k+1)})$ было бы как можно меньшим. Будем искать $w^{(k+1)}$ в виде

$$w^{(k+1)} = w^{(k)} + \Delta w.$$

Как известно из математического анализа, $\forall\, \varepsilon > 0\ \exists\, \delta > 0$: значения функции Q в δ–окрестности точки $w^{(k)}$ можно представить (с точностью до ε) линейной формой, т.е. для каждого вектора $\Delta w \in \mathbf{R}^n$, такого, что $\|\Delta w\| \leq \delta$, верно соотношение

$$Q(w^{(k+1)}) = Q(w^{(k)} + \Delta w) \approx_\varepsilon Q(w^{(k)}) + a_1 \Delta w_1 + \ldots + a_n \Delta w_n, \qquad (2.24)$$

где $\Delta w_1, \ldots, \Delta w_n$ – компоненты вектора Δw, и $\forall\, x, y \in \mathbf{R}$ запись $x \approx_\varepsilon y$ обозначает утверждение $|x - y| < \varepsilon$.

Вектор $(a_1, \ldots, , a_n)$ с компонентами из (2.24) обозначается записью $\nabla Q(w^{(k)})$ и называется **градиентом** функции Q в точке $w^{(k)}$, его компоненты a_1, …, a_n обозначаются соответственно записями

$$\frac{\partial Q}{\partial w_1}(w^{(k)}), \ldots, \frac{\partial Q}{\partial w_n}(w^{(k)}).$$

Соотношение (2.24) можно записать, используя обозначение для скалярного произведения векторов:

$$Q(w^{(k+1)}) = Q(w^{(k)} + \Delta w) \approx_\varepsilon Q(w^{(k)}) + \langle \nabla Q(w^{(k)}), \Delta w \rangle,$$

откуда видно, что выбор точки $w^{(k+1)}$ из δ–окрестности точки $w^{(k)}$, так, чтобы значение $Q(w^{(k+1)})$ (с точностью до ε) было бы как можно меньше, сводится к выбору вектора $\Delta w \in \mathbf{R}^n$, такого, что $\|\Delta w\| \leq \delta$, и значение

$$\langle \nabla Q(w^{(k)}), \Delta w \rangle \tag{2.25}$$

было бы как можно меньше.

Рассмотрим задачу выбора такого вектора Δw в общем виде. Пусть a, b – пара ненулевых векторов из линейного пространства со скалярным произведением $\langle\,\rangle$. Исследуем вопрос о том, как при фиксированном векторе a выбрать вектор b с ограничением $\|b\| \leq \delta$, чтобы скалярное произведение $\langle a, b \rangle$ принимало наименьшее возможное значение.

Обозначим записью $\cos(a, b)$ число $\frac{\langle a,b \rangle}{\|a\|\,\|b\|}$. Таким образом,

$$\langle a, b \rangle = \|a\|\,\|b\|\,\cos(a, b). \tag{2.26}$$

Согласно неравенству Коши-Буняковского, верны неравенства

$$\langle a, b \rangle \leq \|a\|\,\|b\| \quad \text{и} \quad \langle -a, b \rangle \leq \|-a\|\,\|b\|,$$

второе из которых равносильно неравенству $-\|a\|\,\|b\| \leq \langle a, b \rangle$, поэтому

$$-1 \leq \cos(a, b) \leq 1.$$

Докажем, что $\begin{cases} \cos(a,b) = 1 & \Leftrightarrow \ \exists\, t > 0 : b = at, \\ \cos(a,b) = -1 & \Leftrightarrow \ \exists\, t > 0 : b = -at. \end{cases}$

- Если $\exists\, t > 0 : b = at$, $\cos(a, b) = \frac{\langle a,b \rangle}{\|a\|\,\|b\|} = \frac{\langle a,at \rangle}{\|a\|\,\|at\|} = \frac{\langle a,a \rangle\, t}{\|a\|\,\|a\|\,t} = 1.$
- Если $\exists\, t > 0 : b = -at$, то $\cos(a, b) = \frac{\langle a,b \rangle}{\|a\|\,\|b\|} = \frac{\langle a,-at \rangle}{\|a\|\,\|-at\|} = \frac{\langle a,a \rangle\,(-t)}{\|a\|\,\|a\|\,t} = -1.$

- Если же два предыдущих случая не имеют место, то $\forall\, t \in \mathbf{R}$ вектор $at + b$ не является нулевым, поэтому

$$\forall\, t \in \mathbf{R} \quad \|at + b\| > 0,$$

т.е. квадратный трехчлен в (2.15) принимает только положительные значения, откуда следует, что его дискриминант (2.16) отрицателен, т.е. $\langle a, b\rangle^2 - \|a\|^2\|b\|^2 < 0$, поэтому $|\cos(a, b)| \neq 1$. ■

Из приведенных рассуждений следует, что (2.26) принимает наименьшее возможное значение в том случае, когда

- $\cos(a, b) = -1$ (т.е. $b = -at$, где $t > 0$), и
- $\|b\|$ принимает наибольшее возможное значение (т.е. $\|b\| = \delta$).

Таким образом, решением задачи является вектор $b = -a\frac{\delta}{\|a\|}$.

Если под a и b понимаются вектора $\nabla Q(w^{(k)})$ и Δw соответственно, то заключаем, что искомый вектор Δw должен иметь вид

$$\Delta w = -\nabla Q(w^{(k)})\eta, \tag{2.27}$$

где η – некоторое небольшое положительное число, называемое **темпом обучения**. Обычно данное число не вычисляется аналитически, а подбирается в процессе работы алгоритма, с использованием некоторых эвристических соображений, среди которых м.б. следующие:

- если η слишком мало, то алгоритм может работать слишком долго (т.к. число итераций в процессе работы будет слишком большим),
- если η слишком велико, то алгоритм может работать неустойчиво, где под **устойчивостью** работы алгоритма понимается сходимость последовательности $w^{(0)}, w^{(1)}, w^{(2)}, \ldots$.

Как правило, значение η не является фиксированным, а постоянно корректируется в процессе работы алгоритма: сначала оно выбирается небольшим, затем постепенно увеличивается до максимального значения, при котором алгоритм все еще работает устойчиво, в случае возникновения неустойчивости значение η уменьшается, и т.д.

Как было отмечено в описании действия 3, работа алгоритма завершается в том случае когда значения минимизируемой функции Q во всех точках окрестности текущего приближения $w^{(k)}$ к искомому значению примерно (с точностью до ε) одинаковы. Нетрудно видеть, что данная

ситуация эквивалентна тому, что компоненты градиента $\nabla Q(w^{(k)})$ примерно (с точностью до ε) равны нулю. Таким образом, условие завершения работы алгоритма градиентного спуска выражается соотношением

$$\nabla Q(w^{(k)}) \approx_{\varepsilon} (0, \ldots, 0).$$

Как было отмечено выше, найденный вектор $w^{(k)}$, на котором завершается работа данного алгоритма, может быть лишь локальным минимумом функции Q. Он будет глобальным минимумом функции Q, если

- удачно выбрано начальное приближение $w^{(0)}$, или
- функция Q является **выпуклой**, т.е. $\forall\, w, w' \in W,\ \forall\, \alpha \in [0,1]$

$$\begin{aligned} &\alpha w + (1-\alpha)w' \in W, \\ &Q(\alpha w + (1-\alpha)w') \le \alpha Q(w) + (1-\alpha)Q(w'). \end{aligned}$$

Докажем, что если Q выпукла, и в точке $\hat{w} \in W$ верно соотношение

$$\nabla Q(\hat{w}) = (0, \ldots, 0), \tag{2.28}$$

то $Q(\hat{w}) = \min\limits_{w \in W} Q(w)$.

Пусть это неверно, т.е. $\exists\, w \in W : Q(w) < Q(\hat{w})$, тогда $\forall\, \alpha \in [0,1]$

$$\begin{aligned} &Q(\hat{w} + \alpha(w - \hat{w})) = Q(\alpha w + (1-\alpha)\hat{w}) \le \\ &\le \alpha Q(w) + (1-\alpha)Q(\hat{w}) = Q(\hat{w}) - \alpha(Q(\hat{w}) - Q(w)) \end{aligned} \tag{2.29}$$

Как известно из математического анализа, из (2.28) следует, что

$$Q(\hat{w} + \alpha(w - \hat{w})) - Q(\hat{w}) = o(\alpha),$$

т.е. $\lim\limits_{\alpha \to 0} \frac{Q(\hat{w}+\alpha(w-\hat{w})) - Q(\hat{w})}{\alpha} = 0$. Но согласно (2.29), этот предел меньше чем

$$-(Q(\hat{w}) - Q(w)) < 0.$$

Таким образом, в рассматриваемой ситуации результат работы МГС (если он достигается) – глобальный минимум Q.

2.3.3 Модификации метода градиентного спуска

Метод стохастического градиента

В том случае, когда обучающая выборка S имеет большой размер, применение МГС может вызвать большие вычислительные сложности, т.к.

на каждой итерации необходимо вычислять градиент $\nabla Q(w^{(k)})$, который зависит от всех элементов обучающей выборки S:

$$\forall\, i = 1, \ldots, n \quad \frac{\partial Q}{\partial w_i}(w^{(k)}) = \frac{1}{l} \sum_{j=1}^{l} \frac{\partial \mathcal{L}(a(x_j, w^{(k)}), x_j)}{\partial w_i}$$

Для ускорения процесса обучения иногда вместо правила (2.27) используется правило

$$\Delta w = -\nabla \mathcal{L}(a(x_j, w^{(0)}), x_j)\eta, \tag{2.30}$$

где число $j \in \{1, \ldots, l\}$ на каждой итерации процесса обучения выбирается случайно. Соответствующий метод обучения (с правилом (2.30) вместо (2.27)) называется **методом стохастического градиента**.

Одной из актуальных проблем является управление выбором j в (2.30) на каждой итерации процесса обучения, так, чтобы сходимость $w^{(k)}$ к оптимальному параметру была бы как можно более быстрой.

Регуляризация

Одной из нежелательных ситуаций во время обучения является чрезмерный рост $\|w^{(k)}\|$. Данная ситуация может возникнуть, например, в следующем случае: предсказательная модель $a : X \times W \to Y$ имеет вид

$$a(x, w) = sign(\langle x, w \rangle), \quad \text{где } x \in X \subseteq \mathbf{R}^n,$$

и $\exists\, u \in \mathbf{R}^n : \ \forall\, x \in X \ \ \langle x, u \rangle = 0$.

Нетрудно видеть, что в этом случае

$$\forall\, \gamma \in \mathbf{R} \ \ a(x, w + \gamma u) = sign(\langle x, w + \gamma u \rangle) = sign(\langle x, w \rangle) = a(x, w)$$

откуда следует, что если минимальное значение риска будет достигаться на $\hat{w}$, то такое же значение риска будет достигаться на $\hat{w} + \gamma u$ ($\forall\, \gamma \in \mathbf{R}$), т.е. параметр w, минимизирующий риск, м.б. как угодно большим.

Для борьбы с чрезмерным увеличением $\|w^{(k)}\|$ используется метод, называемый **регуляризацией**. Суть данного метода заключается в модификации минимизируемой функции: она может иметь, например, вид

$$Q(a_S) + \frac{\tau}{2}\|w\|^2,$$

где τ – некоторое положительное число. В этом случае (2.27) заменяется на правило

$$\Delta w = -\nabla Q(w^{(0)})\eta - w\tau\eta. \tag{2.31}$$

Можно модифицировать не минимизируемую функцию, а функцию потерь: вместо $\mathcal{L}$ рассматривать $\tilde{\mathcal{L}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{L} + \frac{\tau}{2}\|w\|^2$, в этом случае (2.27) тоже заменяется на (2.31).

2.4 Метод обратного распространения ошибки для обучения нейронных сетей

2.4.1 Идея метода

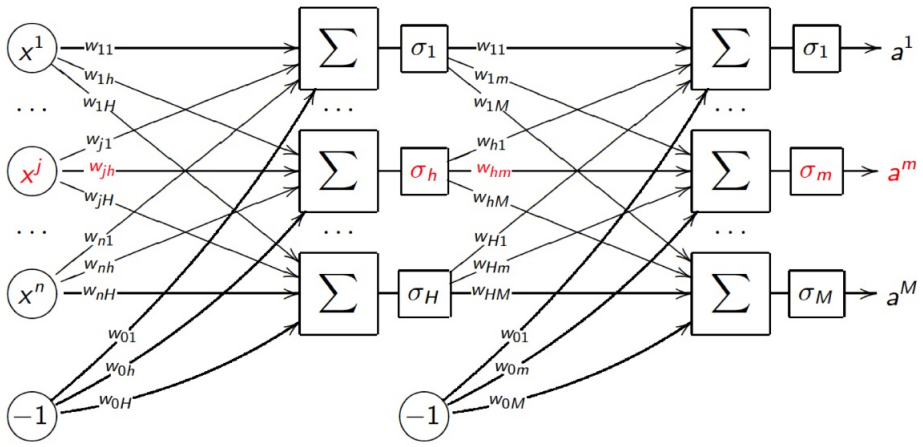
Излагаемый в этом параграфе **метод обратного распространения ошибки (error back propagation)**, или более коротко – **метод обратного распространения (МОР)**, используется при обучении многослойных нейронных сетей (**МНС**). Данный метод является модификацией метода градиентного спуска. Впервые МОР был описан в 1974 г. А. И. Галушкиным, а также независимо и одновременно Полом Дж. Вербосом.

Идея МОР состоит в распространении сигналов ошибки от выходов МНС к ее входам, в направлении, обратном прямому распространению сигналов в обычном режиме работы. Опишем эту идею более подробно.

Напомним, что компонентами МНС являются нейроны,

- на вход нейрона поступает кортеж чисел вида $(x^1, \ldots, x^n) \in \mathbf{R}^n$,
- на выходе нейрон выдает число $a \stackrel{\text{def}}{=} \sigma\Big(\langle x, w\rangle - w_0\Big)$, где σ – функция активации.

Структуру МНС можно представить диаграммой вида



(2.32)

(на данной диаграмме изображена МНС с двумя слоями).

При заданной совокупности w значений весовых коэффициентов w_{ij} эта МНС определяет функцию a_w, отображающую каждый входной вектор $x \in \mathbf{R}^n$ в выходной вектор $a_w(x) \in \mathbf{R}^M$. Если задана обучающая

выборка $S \subseteq \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^M$, то ошибкой данной МНС на паре $(x, y) \in S$ называется число

$$Q(x, y, w) = \frac{1}{2}\|a_w(x) - y\|^2. \tag{2.33}$$

Задача алгоритма МОР заключается в нахождении такой совокупности w весовых коэффициентов данной МНС, которые делают ошибки (2.33) как можно меньше. Алгоритм МОР решает эту задачу путем выполнения нескольких итераций, каждая из которых состоит из двух частей:

- выбор пары $(x, y) \in S$,
- нахождение ошибки (2.33) на выбранной паре (x, y) при текущем наборе весовых коэффициентов w путем вычисления в «прямом направлении» (слева направо) выходов всех нейронов,
- коррекция весовых коэффициентов w_{ij} путем вычисления в «обратном направлении» (сначала корректируются весовые коэффициенты последнего слоя, затем - предпоследнего, и т.д.).

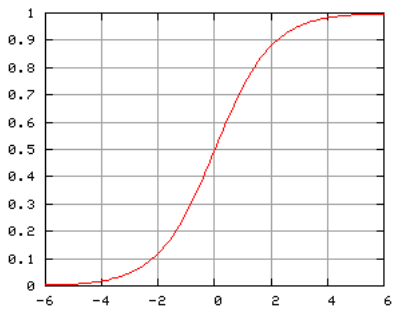
2.4.2 Описание метода

Описание МОР будет изложено на примере двуслойной сети вида (2.32) (для МНС с бóльшим числом слоев метод выглядит аналогично).

Для возможности применения МОР функция активации σ должна быть дифференцируемой. Например, в качестве такой σ может использоваться **сигмоида**:

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}. \tag{2.34}$$

График этой функции имеет вид



Данная функция стремится к 1 при $x \to \infty$ и к 0 при $x \to -\infty$, ее график центрально симметричен относительно точки (0, 0.5).

Ниже будет использоваться легко проверяемое соотношение

$$\sigma'(x) = \sigma(x)(1 - \sigma(x)).$$

Мы будем предполагать, что в рассматриваемой МНС функция активации одинакова для всех входящих в нее нейронов, и имеет вид (2.34).

Алгоритм МОР имеет следующий вид:

1. Инициализация весов МНС небольшими случайными значениями.
2. Делаем итерации (до тех пор пока Q не стабилизируется), каждая итерация заключается в вычислении по текущему набору w весовых коэффициентов нового набора w', который будет текущим в следующей итерации, и имеет следующий вид:
   - случайно выбираем $(x, y) \in S$, $x = (x^1, \ldots, x^n)$, $y = (y^1, \ldots, y^M)$,
   - прямой ход: вычисляем выходы всех нейронов, и

     $$Q(x, y, w) := \frac{1}{2}\sum_{m=1}^{M}(a^m - y^m)^2$$

     $\forall\, m = 1, \ldots, M$ $\frac{\partial Q}{\partial a^m} = a^m - y^m =: \xi^m$,
   - обратный ход (модификация весов в направлении $-\nabla$):

     $$w'_{hm} := w_{hm} - \frac{\partial Q}{\partial w_{hm}}\eta, \quad w'_{jh} := w_{jh} - \frac{\partial Q}{\partial w_{jh}}\eta,$$

     где $\eta \in (0, 1)$ – подбираемый параметр (темп обучения), и частные производные $\frac{\partial Q}{\partial w_{hm}}$, $\frac{\partial Q}{\partial w_{jh}}$ вычисляются следующим образом: пусть $u^1, \ldots, u^H$ – выходы первого слоя, тогда $\forall\, m = 1, \ldots, m$, $\forall\, h = 1, \ldots, H$, $\forall\, j = 1, \ldots, n$

     $$a^m = \sigma\Big(\sum_{h=1}^{H} w_{hm}u^h - w_{0m}\Big),$$

     $$\begin{aligned}\frac{\partial Q}{\partial w_{hm}} &= \frac{\partial Q}{\partial a^m}\frac{\partial a^m}{\partial w_{hm}} = \xi^m\sigma'\Big(\sum_{h=1}^{H} w_{hm}u^h - w_{0m}\Big)u^h = \\ &= \xi^m a^m(1 - a^m)u^h,\end{aligned}$$

     $$\begin{aligned}\frac{\partial Q}{\partial w_{0m}} &= \frac{\partial Q}{\partial a^m}\frac{\partial a^m}{\partial w_{0m}} = \xi^m\sigma'\Big(\sum_{h=1}^{H} w_{hm}u^h - w_{0m}\Big)(-1) = \\ &= -\xi^m a^m(1 - a^m),\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
u^h &= \sigma\Big(\sum_{j=1}^{n} w_{jh}x^j - w_{0h}\Big),\\
\frac{\partial Q}{\partial u^h} &= \sum_{m=1}^{M} \frac{\partial Q}{\partial a^m}\frac{\partial a^m}{\partial u^h} = \sum_{m=1}^{M} \xi^m \sigma'\Big(\sum_{h=1}^{H} w_{hm}u^h - w_{0m}\Big)w_{hm} =\\
&= \sum_{m=1}^{M} \xi^m a^m(1-a^m)w_{hm} =: \zeta^h,\\
\frac{\partial Q}{\partial w_{jh}} &= \frac{\partial Q}{\partial u^h}\frac{\partial u^h}{\partial w_{jh}} = \zeta^h \sigma'\Big(\sum_{j=1}^{n} w_{jh}x^j - w_{0h}\Big)x^j =\\
&= \zeta^h u^h(1-u^h)x^j,\\
\frac{\partial Q}{\partial w_{0h}} &= \frac{\partial Q}{\partial u^h}\frac{\partial u^h}{\partial w_{0h}} = \zeta^h \sigma'\Big(\sum_{j=1}^{n} w_{jh}x^j - w_{0h}\Big)(-1) =\\
&= -\zeta^h u^h(1-u^h).
\end{aligned}
$$

2.4.3 Достоинства и недостатки метода

Основые достоинства МОР:

- низкая сложность,
- легко реализуется на параллельных архитектурах,
- универсальность (пригоден для любых конфигураций МНС).

Основные недостатки МОР заключаются в следующем.

- Неопределенно долгий процесс обучения. В сложных задачах для обучения сети могут потребоваться дни или даже недели, она может и вообще не обучиться.
- В процессе обучения сети значения весов могут в результате коррекции стать очень большими величинами. Это может привести к тому, что большинство нейронов будут функционировать при очень больших значениях весовых коэффициентов, в области, где производная функции активации очень мала. Так как обратно распространяемая в процессе обучения ошибка пропорциональна этой производной, то процесс обучения может стать парализованным.
- Нет гарантии того, что получаемый в результате обучения локальный минимум является хорошим решением задачи обучения.

Для улучшения сходимости алгоритма обратного распространения можно использовать, например, следующие приемы:

- нормализация входных значений: вектор x в каждой паре $(x, y) \in S$ заменяется на $\tilde{x}$, определяемый следующим образом:

$$\forall\, i = 1, \ldots, n \;\; \tilde{x}^i := \frac{x^i - x^i_{min}}{x^i_{max} - x^i_{min}} \quad \text{или} \quad \tilde{x}^i := \frac{x^i - x^i_{average}}{x^i_{avsquare}}$$

  где $x^i_{average}$ – среднее значение, $x^i_{avsquare}$ – среднеквадратическое отклонение ($= \sqrt{\text{дисперсии}}$),

- добавление между слоями МНС промежуточных слоев, реализующих линейные преобразования: если u и v – вектора входов и выходов такого слоя, то реализуемое этим слоем преобразование имеет вид $v = Au + b$, где A и b – матрица и вектор соответствующих размерностей, коэффициенты матрицы A и вектора b тоже обучаются,

- изменение структуры МНС: удаление части нейронов (**dropout**).

2.5 Метод опорных векторов

В этом параграфе излагается наиболее популярный метод машинного обучения – **метод опорных векторов (Support Vector Machines, SVM)**, который был создан в 70-е годы прошлого века сотрудниками Института проблем управления АН СССР В. Н. Вапником и А. Я. Червоненкисом, и впервые опубликован в книге [8] (в которой он назван **методом обобщенного портрета**).

Данный метод предназначен для решения задач классификации и регрессионного анализа.

2.5.1 Оптимальность аппроксимирующих функций

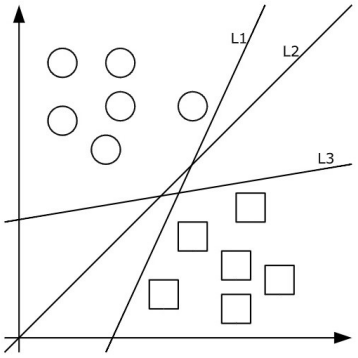
В параграфе 2.2 рассматривалась задача нахождения по строго линейно разделимой выборке $S \subseteq \mathbf{R}^n \times \{-1, 1\}$ АФ a_S вида

$$a_S(x) = sign\Big(\sum_{i=1}^{n} x^i w_i - w_0\Big)$$

такой, что $Q(a_S) = 0$. Как было отмечено в этом параграфе, функция a_S данного вида обладает свойством $Q(a_S) = 0$ тогда и только тогда, когда гиперплоскость P, определяемая уравнением $\sum\limits_{i=1}^{n} x^i w_i - w_0 = 0$, разделяет

множества S^+ и S^-, т.е. S^+ и S^- содержатся в разных полупространствах, на которые P делит $\mathbf{R}^n$.

Можно доказать, что задача построения разделяющей гиперплоскости для строго линейно разделимой выборки S имеет бесконечно много решений. Например, несколько различных решений данной задачи изображено на нижеследующем рисунке (в данном случае $n = 2$):



где кружочки обозначают элементы S^+, а квадратики - элементы S^-.

Встает вопрос о том, можно ли ввести какие-либо меры оптимальности решений данной задачи.

В качестве одной из мер оптимальности функции a_S указанного выше вида можно рассматривать, например, расстояние

$$\rho(S^+ \cup S^-, P) \tag{2.35}$$

между $S^+ \cup S^-$ и P. Напомним, что $\forall\, A, B \subseteq \mathbf{R}^n$ расстояние $\rho(A, B)$ между A и B определяется как $\inf\limits_{a \in A, b \in B} \|a - b\|$.

Назовем **полосой, разделяющей S^+ и S^-**, и определяемой гиперплоскостью P, часть пространства $\mathbf{R}^n$, заключенную между гиперплоскостями P_{S^+} и P_{S^-}, которые получаются параллельным переносом гиперплоскости P вдоль вектора нормали к ней

- по направлению к S^+ на расстояние $\rho(P, S^+)$, и
- по направлению к S^- на расстояние $\rho(P, S^-)$,

соответственно. Будем обозначать эту полосу записью $[P_{S^+}, P_{S^-}]$. Нетрудно видеть, что во внутренней части полосы $[P_{S^+}, P_{S^-}]$ точек из S^+ и S^- нет.

Расстояние $\rho(P_{S^+}, P_{S^-})$ назовем **шириной** полосы $[P_{S^+}, P_{S^-}]$. Можно доказать, что (2.35) достигает максимального значения, когда ширина

полосы $[P_{S^+}, P_{S^-}]$ равна $\rho(S^+, S^-)$, и P находится посередине этой полосы.

Назовем гиперплоскость P, находящуюся посередине полосы $[P_{S^+}, P_{S^-}]$ с шириной $\rho(S^+, S^-)$, **оптимальной гиперплоскостью**, разделяющей выборку S. Ниже излагается метод построения такой гиперплоскости.

Кроме того, ниже вводится еще одна мера оптимальности АФ a_S, и излагается алгоритм построения функции a_S, оптимальной относительно этой меры.

2.5.2 Построение оптимальной разделяющей гиперплоскости для строго линейно разделимой выборки

Описание задачи

В этом пункте мы предполагаем, что задана строго линейно разделимая выборка S, и P – какая-либо гиперплоскость, разделяющая S^+ и S^-.

По определению, определенные выше гиперплоскости P_{S^+} и P_{S^-} параллельны, поэтому можно считать, что их уравнения различаются лишь в свободном члене и имеют вид

$$\langle x, v\rangle - a = 0, \quad \langle x, v\rangle - b = 0, \quad \text{где } v \in \mathbf{R}^n,\ a, b \in \mathbf{R},\ a \neq b. \tag{2.36}$$

$\forall\, \lambda \in \mathbf{R} \setminus \{0\}$ уравнения

$$\langle x, \lambda v\rangle - \lambda a = 0, \quad \langle x, \lambda v\rangle - \lambda b = 0 \tag{2.37}$$

равносильны соответствующим уравнениям в (2.36), т.е. определяют те же самые гиперплоскости P_{S^+} и P_{S^-}. Нетрудно видеть, что если в качестве λ взять число $\frac{2}{a-b}$, то уравнения (2.37) будут равносильны соответствующим уравнениям

$$\langle x, w\rangle - w_0 = 1, \quad \langle x, w\rangle - w_0 = -1, \tag{2.38}$$

где $w = \lambda v$, $w_0 = \frac{a+b}{a-b}$. Таким образом, можно считать, что

- гиперплоскости P_{S^+} и P_{S^-} определяются уравнениями (2.38), и
- точки из S^+ и S^- находятся в непересекающихся полупространствах, определяемых P_{S^+} и P_{S^-}, т.е. удовлетворяют соотношениям

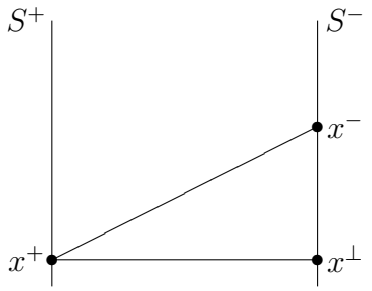
  $$\langle x, w\rangle - w_0 \geq 1 \quad \text{и} \quad \langle x, w\rangle - w_0 \leq -1$$

  соответственно.

Вычислим ширину ρ полосы $[P_{S^+}, P_{S^-}]$.

Выберем на P_{S^+} и P_{S^-} точки x^+ и x^- соответственно. Пусть $x^\perp$ – основание перпендикуляра, опущенного из точки x^+ на гиперплоскость P_{S^-}.

Искомая ширина ρ равна длине катета $[x^+, x^\perp]$ прямоугольного треугольника с вершинами в точках $x^+, x^-, x^\perp$:



Эту длину можно вычислить как произведение

- длины гипотенузы $[x^+, x^-]$, т.е. $\|x^+ - x^-\|$, и
- косинуса угла $\varphi = \widehat{x^- x^+ x^\perp}$, который выражается через скалярное произведение: $\cos\varphi = \frac{\langle x^+ - x^-, x^+ - x^\perp\rangle}{\|x^+ - x^-\|\,\|x^+ - x^\perp\|}$,

т.е. $\rho = \frac{\langle x^+ - x^-, x^+ - x^\perp\rangle}{\|x^+ - x^\perp\|}$. Поскольку вектор $x^+ - x^\perp$ ортогонален к P, то он имеет вид μw для некоторого числа μ, поэтому

$$\rho = \frac{\langle x^+ - x^-, \mu w\rangle}{\|\mu w\|} = \frac{\mu}{|\mu|}\frac{\langle x^+ - x^-, w\rangle}{\|w\|} = \sigma\frac{\langle x^+ - x^-, w\rangle}{\|w\|}, \tag{2.39}$$

где $\sigma = 1$ или -1. Поскольку $x^+ \in P_{S^+}$ и $x^- \in P_{S^-}$, то

$$\langle x^+, w\rangle - w_0 = 1, \quad \langle x^-, w\rangle - w_0 = -1,$$

откуда следует, что

$$\langle x^+ - x^-, w\rangle = \langle x^+, w\rangle - \langle x^-, w\rangle = (w_0 + 1) - (w_0 - 1) = 2, \tag{2.40}$$

Из (2.39) и (2.40) следует, что $\sigma = 1$, и $\rho = \frac{2}{\|w\|}$.

Таким образом, задача поиска оптимальной разделяющей гиперплоскости для S, т.е. такой гиперплоскости P, которая определяет полосу $[S_P^+, S_P^-]$ максимальной ширины, сводится к следующей задаче: найти такие $w \in \mathbf{R}^n$ и $w_0 \in \mathbf{R}$, чтобы

- значение $\|w\|$ было минимально возможным, и

- были выполнены условия $\begin{cases} \forall\, x \in S^+ & \langle x, w\rangle - w_0 \geq 1, \\ \forall\, x \in S^- & \langle x, w\rangle - w_0 \leq -1, \end{cases}$ которые можно переписать в виде

$$\forall\, x \in X_S \quad y_x(\langle x, w\rangle - w_0) - 1 \geq 0 \tag{2.41}$$

где $X_S \stackrel{\text{def}}{=} \{x \in \mathbf{R}^n \mid (x, y_x) \in S\}$.

Если решение (w, w_0) этой задачи найдено, то оптимальная разделяющая гиперплоскость P определяется уравнением $\langle x, w\rangle - w_0 = 0$.

Заметим, что решение данной задачи совпадает с решением задачи

$$\frac{\|w\|^2}{2} \to \min \tag{2.42}$$

при условиях (2.41). Таким образом, мы свели задачу построения оптимальной разделяющей гиперплоскости для строго линейно разделимой выборки к оптимизационной задаче (2.42) при условиях (2.41).

Метод решения оптимизационной задачи

В этом пункте мы рассмотрим подход к решению общей оптимизационной задачи, частным случаем которой является оптимизационная задача (2.42) при условиях (2.41).

Данная общая задача имеет следующий вид: заданы

- функция $f : \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}$ (называемая **целевой** функцией), которая является **выпуклой**, т.е.

$$\forall\, x, x' \in \mathbf{R}^n,\ \forall\, \alpha \in [0, 1] \quad f(\alpha x + (1-\alpha)x') \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(x'),$$

- множество **условий** вида $g_1(x) \leq 0, \ldots, g_m(x) \leq 0$, где $g_1, \ldots, g_m$ – выпуклые функции вида $\mathbf{R}^n \to \mathbf{R}$.

Обозначим записью $D_{g_1,\ldots,g_m}$ множество

$$D_{g_1,\ldots,g_m} \stackrel{\text{def}}{=} \{x \in \mathbf{R}^n \mid \forall\, i = 1, \ldots, m \;\; g_i(x) \leq 0\}. \tag{2.43}$$

Требуется найти аргумент $\hat{x} \in D_{g_1,\ldots,g_m}$, на котором достигается минимальное значение функции f, в предположении что минимальность рассматривается относительно множества $D_{g_1,\ldots,g_m}$, т.е. требуется, чтобы

$$f(\hat{x}) = \min_{x \in D_{g_1,\ldots,g_m}} f(x).$$

Данную задачу можно решать с помощью **теоремы Каруша-Куна-Таккера**, которую называют основной теоремой выпуклой нелинейной оптимизации. Ниже мы приводим частный случай этой теоремы.

Теорема 3 (W.Karush, 1942, H.Kuhn and A.Tucker, 1951).
Пусть заданы выпуклые функции f, $g_1, \ldots, g_m$ вида $\mathbf{R}^n \to \mathbf{R}$, причем

$$\exists\, x \in \mathbf{R}^n : \forall\, i = 1, \ldots, m \quad g_i(x) < 0. \tag{2.44}$$

Обозначим символом L функцию (называемую **функцией Лагранжа**)

$$L = f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(x), \tag{2.45}$$

где $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$ – переменные, называемые **множителями Лагранжа**.
$\forall\, \hat{x} \in D_{g_1,\ldots,g_m}$ следующие утверждения эквивалентны:

$$f(\hat{x}) = \min_{x \in D_{g_1,\ldots,g_m}} f(x), \tag{2.46}$$

$$\exists\, \hat{\lambda}_1, \ldots, \hat{\lambda}_m \in \mathbf{R} : \begin{cases} \forall\, i = 1 \ldots, m \quad \hat{\lambda}_i \geq 0, \\ \forall\, i = 1 \ldots, m \quad \hat{\lambda}_i g_i(\hat{x}) = 0, \\ L(\hat{x}, \hat{\lambda}_1 \ldots, \hat{\lambda}_m) = \min\limits_{x \in \mathbf{R}^n} L(x, \hat{\lambda}_1 \ldots, \hat{\lambda}_m). \end{cases} \tag{2.47}$$

Если функции $f, g_1, \ldots, g_m$ дифференцируемые, то функция Лагранжа L тоже будет дифференцируемой, и этом случае третье соотношение в (2.47) равносильно соотношению

$$\forall\, i = 1, \ldots, n \quad \frac{\partial L}{\partial x_i}(\hat{x}, \hat{\lambda}_1, \ldots, \hat{\lambda}_m) = 0. \tag{2.48}$$

Доказательство.
Сначала докажем, что если для точки $\hat{x} \in D_{g_1,\ldots,g_m}$ верно утверждение (2.47), то для нее будет верно утверждение (2.46).
Т.к. $\forall\, i = 1, \ldots, m$, $\forall\, x \in D_{g_1,\ldots,g_m}$ $\hat{\lambda}_i g_i(x) \leq 0$, то

$$\forall\, x \in D_{g_1,\ldots,g_m} \quad L(x, \hat{\lambda}_1, \ldots, \hat{\lambda}_m) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} \hat{\lambda}_i g_i(x) \leq f(x). \tag{2.49}$$

Из второго соотношения в (2.47) следует, что

$$L(\hat{x}, \hat{\lambda}_1, \ldots, \hat{\lambda}_m) = f(\hat{x}) + \sum_{i=1}^{m} \hat{\lambda}_i g_i(\hat{x}) = f(\hat{x}) + \sum_{i=1}^{m} 0 = f(\hat{x}). \tag{2.50}$$

Из третьего соотношения в (2.47) следует, что

$$\forall\, x \in \mathbf{R}^n \quad L(\hat{x}, \hat{\lambda}_1, \ldots, \hat{\lambda}_m) \le L(x, \hat{\lambda}_1, \ldots, \hat{\lambda}_m). \tag{2.51}$$

Из (2.49) (2.50) и (2.51) следует, что для $\hat{x}$ верно (2.46):

$$\forall\, x \in D_{g_1,\ldots,g_m} \quad f(\hat{x}) = L(\hat{x}, \hat{\lambda}_1, \ldots, \hat{\lambda}_m) \le L(x, \hat{\lambda}_1, \ldots, \hat{\lambda}_m) \le f(x).$$

Теперь докажем, что если для точки $\hat{x} \in D_{g_1,\ldots,g_m}$ верно утверждение (2.46), то для нее будет верно утверждение (2.47).

Обозначим символом Λ множество всех векторов $(\lambda_0, \ldots, \lambda_m) \in \mathbf{R}^{m+1}$, каждый из которых удовлетворяет следующему условию: $\exists\, x \in \mathbf{R}^n$:

$$\begin{cases} \lambda_0 > f(x) - f(\hat{x}), \\ \forall\, i = 1, \ldots, m \;\; \lambda_i \ge g_i(x). \end{cases}$$

Очевидно что множество Λ непусто.

Нулевой вектор $\bar{0} = (0, \ldots, 0)$ не входит в Λ, т.к. иначе $\exists\, x \in \mathbf{R}^n$:

$$\begin{cases} 0 > f(x) - f(\hat{x}) \quad (\Rightarrow \quad f(x) < f(\hat{x})), \\ \forall\, i = 1, \ldots, m \;\; 0 \ge g_i(x) \quad (\Rightarrow \quad x \in D_{g_1,\ldots,g_m}), \end{cases}$$

т.е. $\min\limits_{x \in D_{g_1,\ldots,g_m}} f(x) < f(\hat{x})$, что противоречит предположению (2.46).

Докажем, что множество Λ выпукло, т.е. $\forall\, \lambda, \lambda' \in \Lambda$, $\forall\, \alpha \in [0, 1]$

$$\lambda^{(\alpha)} \stackrel{\text{def}}{=} \alpha\lambda + (1 - \alpha)\lambda' \in \Lambda. \tag{2.52}$$

Действительно, если λ и λ' имеют вид $(\lambda_0, \ldots, \lambda_m)$ и $(\lambda'_0, \ldots, \lambda'_m)$ соответственно, и вектора x, x' таковы, что

$$\begin{array}{l} \lambda_0 > f(x) - f(\hat{x}), \;\; \forall\, i = 1, \ldots, m \;\; \lambda_i \ge g_i(x) \\ \lambda'_0 > f(x') - f(\hat{x}), \;\; \forall\, i = 1, \ldots, m \;\; \lambda'_i \ge g_i(x') \end{array}$$

то нетрудно проверить (используя выпуклость f, g_1, …, g_m), что вектор $x^{(\alpha)} \stackrel{\text{def}}{=} \alpha x + (1 - \alpha)x'$ обладает свойством

$$\begin{cases} \lambda_0^{(\alpha)} > f(x^{(\alpha)}) - f(\hat{x}), \\ \forall\, i = 1, \ldots, m \;\; \lambda_i^{(\alpha)} \ge g_i(x^{(\alpha)}). \end{cases} \tag{2.53}$$

Распишем (2.53) во всех деталях:

$$\begin{cases} \lambda_0^{(\alpha)} = \alpha\lambda_0 + (1 - \alpha)\lambda'_0 > \\ \qquad > \alpha f(x) - \alpha f(\hat{x}) + (1 - \alpha) f(x') - (1 - \alpha) f(\hat{x}) \ge \\ \qquad \ge f(\alpha x + (1 - \alpha)x') - f(\hat{x}) = f(x^{(\alpha)}) - f(\hat{x}), \\ \forall\, i = 1, \ldots, m \;\; \lambda_i^{(\alpha)} = \alpha\lambda_i + (1 - \alpha)\lambda'_i \ge \\ \qquad \ge \alpha g_i(x) + (1 - \alpha) g_i(x') \ge g_i(\alpha x + (1 - \alpha)x') = g_i(x^{(\alpha)}). \end{cases}$$

Таким образом, (2.52) верно.

Лемма об отделимости.

Множество Λ обладает **свойством отделимости**: $\exists\, \lambda^* \in \mathbf{R}^{m+1}$:

$$\lambda^* \neq \bar{0},\ \forall\, \lambda \in \Lambda\ \ \langle \lambda^*, \lambda \rangle \geq 0 \tag{2.54}$$

(т.е. Λ содержится в одном из полупространств, на которые делит пространство $\mathbf{R}^{m+1}$ гиперплоскость, определяемая уравнением $\langle \lambda^*, x \rangle = 0$).

Доказательство.

Если размерность $Lin(\Lambda)$ линейной оболочки множества Λ (т.е. минимального линейного подпространства пространства $\mathbf{R}^{m+1}$, содержащего Λ) меньше чем $m+1$, то в качестве искомого вектора λ^* можно взять любой ненулевой вектор из ортогонального дополнения $Lin(\Lambda)$. В этом случае (2.54) верно по причине того, что

$$\forall\, \lambda \in \Lambda \quad \langle \lambda^*, \lambda \rangle = 0.$$

Пусть размерность $Lin(\Lambda)$ равна $m+1$. В этом случае Λ содержит линейно независимое множество из $m+1$ векторов. Обозначим векторы, входящие в это множество, записями $v_1, \ldots, v_{m+1}$.

Определим $\vec{\Lambda} \stackrel{\text{def}}{=} \{\xi\lambda \mid \xi > 0, \lambda \in \Lambda\}$. Отметим, что $\Lambda \subseteq \vec{\Lambda}$, и $\bar{0} \notin \vec{\Lambda}$.

Множество $\vec{\Lambda}$ выпуклое, т.к. $\forall\, \xi, \xi' > 0$, $\forall\, \lambda, \lambda' \in \vec{\Lambda}$, $\forall\, \alpha \in [0,1]$

$$\alpha(\xi\lambda) + (1-\alpha)(\xi'\lambda') \in \vec{\Lambda}. \tag{2.55}$$

Действительно, вектор в (2.55) равен $\xi''\lambda''$, где

- $\xi'' = \alpha\xi + (1-\alpha)\xi' > 0$, и
- $\lambda'' = \frac{\alpha\xi}{\xi''}\lambda + \frac{(1-\alpha)\xi'}{\xi''}\lambda' \in [\lambda, \lambda']$, поэтому $\lambda'' \in \Lambda$.

Докажем, что $v = \sum\limits_{i=1}^{m+1} v_i$ – внутренняя точка $\vec{\Lambda}$, т.е. $\exists\, \varepsilon > 0$: ε–окрестность $U_v^\varepsilon \stackrel{\text{def}}{=} \{v' \in \mathbf{R}^{m+1} \mid \|v' - v\| < \varepsilon\}$ вектора v лежит в $\vec{\Lambda}$.

Обозначим символом V множество, состоящее из всех векторов вида $\sum\limits_{i=1}^{m+1} \alpha_i v_i$, где $\forall\, i = 1, \ldots, m\ \ |\alpha_i| \leq \frac{1}{2}$. Для каждого вектора x из единичной сферы $S \stackrel{\text{def}}{=} \{x \in \mathbf{R}^{m+1} \mid \|x\| = 1\}$ обозначим записью ε_x максимальное число, такое, что $\varepsilon_x x \in V$ (такое число существует, т.к. множество V является ограниченным). Поскольку единичная

сфера в $\mathbf{R}^{m+1}$ – компакт, то непрерывная функция $x \mapsto \varepsilon_x$ на S достигает наименьшего значения $\varepsilon > 0$ на некотором элементе S.

Итак, $\forall\, x \in S \;\; \varepsilon x \in V$, откуда следует, что $U_{\bar{0}}^{\varepsilon} \subseteq V$, поэтому

$$U_v^{\varepsilon} = v + U_{\bar{0}}^{\varepsilon} \subseteq v + V = \{ \sum_{i=1}^{m+1} \alpha_i v_i \mid \tfrac{1}{2} \leq \alpha_i \leq \tfrac{3}{2} \} \subseteq \vec{\Lambda}.$$

Следовательно, каждый элемент $U_{-v}^{\varepsilon} = -v + U_{\bar{0}}^{\varepsilon}$ не лежит в $\vec{\Lambda}$ (иначе некоторый отрезок из $\vec{\Lambda}$ с концами в U_{-v}^{ε} и U_v^{ε} содержал бы $\bar{0}$).

Обозначим записью $\vec{\Lambda}^c$ **замыкание** множества $\vec{\Lambda}$, т.е. множество, получаемое добавлением к $\vec{\Lambda}$ всех его предельных точек. Нетрудно доказать, что замыкание любого выпуклого множества является выпуклым множеством. В частности, множество $\vec{\Lambda}^c$ выпукло.

Поскольку $U_{-v}^{\varepsilon} \cap \vec{\Lambda} = \emptyset$, то $-v$ не является предельной точкой множества $\vec{\Lambda}$, поэтому $-v \notin \vec{\Lambda}^c$.

Определим u_0 как такой вектор, из $\vec{\Lambda}^c$, что

$$\rho(-v, u_0) = \min\{\rho(-v, u) \mid u \in \vec{\Lambda}^c\}.$$

где ρ – евклидово расстояние между векторами. Такой вектор существует. Действительно, обозначим

- символом R расстояние от $-v$ до какого-либо элемента $\vec{\Lambda}^c$, и
- записью B_{-v}^R замкнутый шар с центром в $-v$ радиуса R.

Поскольку множество B_{-v}^R замкнуто и ограничено, то непустое множество $\vec{\Lambda}^c \cap B_{-v}^R$ тоже замкнуто и ограничено, т.е. оно компактно. Нетрудно видеть, что

$$\min\{\rho(-v, u) \mid u \in \vec{\Lambda}^c\} = \min\{\rho(-v, u) \mid u \in \vec{\Lambda}^c \cap B_{-v}^R\}.$$

Существование точки u_0, на которой функция $u \mapsto \rho(-v, u)$ на компактном множестве $\vec{\Lambda}^c \cap B_{-v}^R$ принимает наименьшее значение, обосновывается теми же методами, которыми обосновывается аналогичное утверждение в теореме из параграфа 2.1.

Также аналогичными методами обосновывается следующее утверждение: гиперплоскость P, проходящая через точку u_0 и ортогональная отрезку $[-v, u_0]$, делит пространство $\mathbf{R}^{m+1}$ на два полупространства, одно из которых (обозначим его Z) имеет вид

$$Z = \{x \in \mathbf{R}^{m+1} \mid x = u_0 \text{ или } \widehat{-vu_0x} \geq \tfrac{\pi}{2}\}$$

и $\vec{\Lambda}^c \subseteq Z$.

Докажем, что $\bar{0} \in P$. Пусть $\bar{0} \notin P$. Тогда $\bar{0} \neq u_0 \in P$. Т.к. $\bar{0} \in \vec{\Lambda}^c$ ($\bar{0}$ – предельная точка $\vec{\Lambda}$), то $\widehat{-vu_0\bar{0}} \geq \frac{\pi}{2}$. Поскольку $u_1 \stackrel{\text{def}}{=} 2u_0 \in \vec{\Lambda}^c$, то $\widehat{-vu_0u_1} \geq \frac{\pi}{2}$. Однако углы $(-vu_0\bar{0})$ и $(-vu_0u_1)$ являются смежными, сумма их величин равна π, что возможно только если $\widehat{-vu_0\bar{0}} = \frac{\pi}{2}$, поэтому $\bar{0} \in P$.

Вектор, определяемый отрезком $[-v, u_0]$, т.е. $u_0 - (-v) = u_0 + v$, ортогонален P и принадлежит Z, поэтому

$$Z = \{x \in \mathbf{R}^{m+1} \mid \langle u_0 + v, x\rangle \geq 0\}$$

и в качестве искомого вектора λ^* можно взять $u_0 + v$. ■

Продолжим доказательство теоремы Каруша-Куна-Таккера.
Пусть вектор λ^*, обладающий свойством (2.54), имеет вид $(\lambda_0^*, \ldots, \lambda_m^*)$.

1. Докажем, что $\forall\, i = 0, \ldots, m \;\; \lambda_i^* \geq 0$.

   Поскольку Λ содержит вектора

   $$\lambda^{(0)} = (1, 0, \ldots, 0) \quad \text{и} \quad \lambda^{(i)} = (\varepsilon, 0 \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0) \quad (\forall\, i = 1, \ldots, m)$$

   где $\varepsilon > 0$, и единица в $\lambda^{(i)}$ стоит в позиции номер i (мы считаем, что первая позиция в $\lambda^{(i)}$ имеет номер 0), то из (2.54) следует, что

   $$\begin{array}{l} \langle \lambda^*, \lambda^{(0)}\rangle = \lambda_0^* \geq 0 \\ \forall\, i = 1, \ldots, m \;\; \langle \lambda^*, \lambda^{(i)}\rangle = \lambda_0^*\varepsilon + \lambda_i^* \geq 0 \end{array}$$

   откуда, ввиду произвольности ε, заключаем, что $\lambda_i^* \geq 0$.

2. Докажем, что

   $$\forall\, i \in \{1, \ldots, m\} \quad \lambda_i^* g_i(\hat{x}) = 0. \tag{2.56}$$

   Т.к. $\forall\, \varepsilon > 0$ множество Λ содержит вектор

   $$\lambda \stackrel{\text{def}}{=} (\varepsilon, 0, \ldots, 0, g_i(\hat{x}), 0, \ldots, 0),$$

   то из (2.54) следует, что $\langle \lambda^*, \lambda\rangle = \lambda_0^*\varepsilon + \lambda_i^* g_i(\hat{x}) \geq 0$, откуда, ввиду произвольности ε, заключаем, что $\lambda_i^* g_i(\hat{x}) \geq 0$.

   Таким образом, либо $\lambda_i^* g_i(\hat{x}) = 0$, либо $\lambda_i^* g_i(\hat{x}) > 0$. Однако если бы было верно неравенство $\lambda_i^* g_i(\hat{x}) > 0$, то, учитывая доказанное в предыдущем пункте неравенство $\lambda_i^* \geq 0$, заключаем, что $g_i(\hat{x}) > 0$, что противоречит условию $g_i(\hat{x}) \leq 0$.

3. Докажем, что $\forall\, x \in \mathbf{R}^n$

$$\lambda_0^* f(\hat{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* g_i(\hat{x}) \le \lambda_0^* f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* g_i(x). \qquad (2.57)$$

Из (2.56) следует, что левая часть (2.57) равна $\lambda_0^* f(\hat{x})$.

Т.к. $\forall\, \varepsilon > 0$ множество Λ содержит вектор

$$\lambda \stackrel{\text{def}}{=} (f(x) - f(\hat{x}) + \varepsilon, g_1(x), \ldots, g_m(x)),$$

то из (2.54) следует, что

$$\langle \lambda^*, \lambda \rangle = \lambda_0^*(f(x) - f(\hat{x}) + \varepsilon) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* g_i(x) \ge 0,$$

откуда, ввиду произвольности ε, следует (2.57).

4. Докажем, что $\lambda_0^* \ne 0$.

Если $\lambda_0^* = 0$, то из $\lambda^* \ne \bar{0}$ следует, что $\exists\, i \in \{1, \ldots, m\} : \lambda_i^* > 0$.

По предположению, для некоторого $x \in \mathbf{R}$ выполнено условие (2.44). Для этого x верно также (2.57), однако в данном случае левая часть (2.57) равна 0, а правая часть (2.57) меньше 0, что невозможно.

Искомые значения $\hat{\lambda}_1, \ldots, \hat{\lambda}_m$ определяются как $\frac{\lambda_1^*}{\lambda_0^*}, \ldots, \frac{\lambda_m^*}{\lambda_0^*}$.

Истинность каждого из трех соотношений в (2.47) следует из соответствующих пунктов изложенного выше рассуждения.

Докажем, что если функции $f, g_1, \ldots, g_m$ дифференцируемые, то третье соотношение в (2.47) равносильно соотношению (2.48), т.е.

$$L(\hat{x}, \hat{\lambda}) = \min_{x \in \mathbf{R}^n} L(x, \hat{\lambda}) \quad \Leftrightarrow \quad \forall\, i = 1, \ldots, n \quad \frac{\partial L}{\partial x_i}(\hat{x}, \hat{\lambda}) = 0, \qquad (2.58)$$

где $\hat{\lambda} = (\hat{\lambda}_1 \ldots, \hat{\lambda}_m)$.

Импликация «$\Rightarrow$» в (2.58) верна потому, что ее правая часть является необходимым условием минимума дифференцируемой функции.

Обоснуем импликацию «$\Leftarrow$» в (2.58). Из выпуклости $f, g_1, \ldots, g_m$ и неотрицательности $\hat{\lambda}_1$, …, $\hat{\lambda}_m$ следует выпуклость функции $x \mapsto L(x, \hat{\lambda})$:

$$\begin{aligned}
&\forall\, x, x' \in \mathbf{R}^n,\ \forall\, \alpha \in [0,1] \quad L(\alpha x + (1-\alpha)x', \hat{\lambda}) = \\
&= f(\alpha x + (1-\alpha)x') + \sum_{i=1}^{m} \hat{\lambda}_i g_i(\alpha x + (1-\alpha)x') \le \\
&\le \alpha f(x) + (1-\alpha) f(x') + \sum_{i=1}^{m} \hat{\lambda}_i (\alpha g_i(x) + (1-\alpha) g_i(x')) = \\
&= \alpha L(x, \hat{\lambda}) + (1-\alpha) L(x', \hat{\lambda}),
\end{aligned}$$

откуда на основании такого же рассуждения, которое приведено в конце пункта 2.3.2, следует, что значение аргумента $\hat{x}$, удовлетворяющее правой части (2.58), является глобальным минимумом этой функции. ■

Применение метода

Применим изложенный выше метод к оптимизационной задаче (2.42) при условиях (2.41). В данном случае

- целевая функция f имеет вид $\frac{\|w\|^2}{2}$, и
- условия являются линейными неравенствами

$$y_x(\langle x, w\rangle - w_0) - 1 \geq 0, \quad \text{где } x \in X_S. \tag{2.59}$$

Докажем, что целевая функция выпукла. Данная функция является суперпозицией трех функций: функции $w \mapsto \|w\|$, функции $x \mapsto x^2$, и функции $x \mapsto \frac{1}{2}x$. Эти функции выпуклы, т.к.

- выпуклость функции $w \mapsto \|w\|$ следует из неравенства треугольника ($\|a + b\| \leq \|a\| + \|b\|$) для нормы в произвольном векторном пространстве: $\forall\, w, w' \in \mathbf{R}^n,\ \forall\, \alpha \in [0, 1]$

$$\|\alpha w + (1 - \alpha)w'\| \leq \|\alpha w\| + \|(1 - \alpha)w'\| = \alpha\|w\| + (1 - \alpha)\|w'\|,$$

- выпуклость функции $x \mapsto x^2$ обосновывается следующим образом: $\forall\, x, x' \in \mathbf{R},\ \forall\, \alpha \in [0, 1]$ требуемое неравенство

$$(\alpha x + (1 - \alpha)x')^2 \leq \alpha x^2 + (1 - \alpha)(x')^2$$

  после раскрытия скобок, перегруппировки слагаемых и приведения подобных членов преобразуется в эквивалентное неравенство

$$\alpha^2(x - x')^2 \leq \alpha(x - x')^2$$

  которое верно потому, что $\alpha \in [0, 1]$,

- функция $x \mapsto \frac{1}{2}x$ выпукла потому, что любая линейная функция является выпуклой.

Нетрудно доказать, что если функции $f : \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}$ и $g : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ выпуклы и, кроме того, g монотонно неубывающая, то их суперпозиция $(g \circ f)$ тоже выпукла. Действительно, $\forall\, x, x' \in \mathbf{R}^n,\ \forall\, \alpha \in [0, 1]$

$$\begin{aligned}
&(g \circ f)(\alpha x + (1 - \alpha)x') = g(f(\alpha x + (1 - \alpha)x')) \leq \\
&\leq g(\alpha f(x) + (1 - \alpha)f(x')) \leq \alpha g(f(x)) + (1 - \alpha)g(f(x')) = \\
&= \alpha(g \circ f)(x) + (1 - \alpha)(g \circ f)(x').
\end{aligned}$$

Поскольку функции $x \mapsto x^2$ и $x \mapsto \frac{1}{2}x : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ – выпуклы и монотонно неубывающие, то, следовательно их суперпозиция с выпуклой функцией $w \mapsto \|w\|$, т.е. функция $w \mapsto \frac{1}{2}\|w\|^2$ тоже выпукла. ■

Функция Лагранжа для данной задачи имеет вид

$$L = \frac{\|w\|^2}{2} - \sum_{x \in X_S} \lambda_x (y_x(\langle x, w \rangle - w_0) - 1), \tag{2.60}$$

и соотношение (2.48) имеет следующий вид:

$$\forall\, i = 1, \ldots, n \quad \hat{w}_i - \sum_{x \in X_S} \hat{\lambda}_x y_x x_i = 0, \quad 0 - \sum_{x \in X_S} \hat{\lambda}_x y_x (-1) = 0,$$

что можно переписать в виде

$$\hat{w} = \sum_{x \in X_S} \hat{\lambda}_x y_x x, \quad \sum_{x \in X_S} \hat{\lambda}_x y_x = 0. \tag{2.61}$$

Из теоремы 3 следует, что исходная задача сводится к задаче поиска вектора $\hat{w}$, числа $\hat{w}_0$, и набора чисел $\hat{\lambda} = \{\hat{\lambda}_x \geq 0 \mid x \in X_S\}$, удовлетворяющих соотношениям в (2.61) и условию

$$\forall\, x \in X_S \quad \begin{cases} y_x(\langle x, \hat{w} \rangle - \hat{w}_0) - 1 \geq 0 \\ \hat{\lambda}_x (y_x(\langle x, \hat{w} \rangle - \hat{w}_0) - 1) = 0. \end{cases} \tag{2.62}$$

Теорема 4.

Задача нахождения объектов $\hat{w}$, $\hat{w}_0$, и $\hat{\lambda} = \{\hat{\lambda}_x \geq 0 \mid x \in X_S\}$, удовлетворяющих соотношениям (2.61) и (2.62), сводится к задаче нахождения объектов $\hat{w}$, $\hat{w}_0$, и $\hat{\lambda}$, минимизирующих значения выражения

$$\sum_{x \in X_S} \hat{\lambda}_x (y_x(\langle x, \hat{w} \rangle - \hat{w}_0) - 1) \tag{2.63}$$

при условиях

$$\begin{cases} \hat{w} = \sum\limits_{x \in X_S} \hat{\lambda}_x y_x x, \quad \sum\limits_{x \in X_S} \hat{\lambda}_x y_x = 0, \\ \forall\, x \in X_S \quad \begin{cases} \hat{\lambda}_x \geq 0 \\ y_x(\langle x, \hat{w} \rangle - \hat{w}_0) - 1 \geq 0. \end{cases} \end{cases} \tag{2.64}$$

Доказательство.

1. Пусть объекты $\hat{w}$, $\hat{w}_0$, и $\hat{\lambda} = \{\hat{\lambda}_x \geq 0 \mid x \in X_S\}$ удовлетворяют соотношениям (2.61) и (2.62). Тогда при их подстановке вместо соответствующих объектов в (2.63) и (2.64) получаем, что

- значение суммы (2.63) будет равно 0 (т.к., согласно второму равенству в (2.62), каждое слагаемое в этой сумме равно 0), и
- соотношения в (2.64) верны, это следует из (2.61) и (2.62).

С другой стороны, сумма (2.63) при условиях (2.64), не может быть меньше 0, т.к., согласно этим условиям, каждое ее слагаемое является произведением неотрицательных чисел.

Таким образом, объекты $\hat{w}$, $\hat{w}_0$, и $\hat{\lambda} = \{\hat{\lambda}_x \geq 0 \mid x \in X_S\}$ – решение задачи минимизации суммы (2.63) при условиях (2.64).

2. Согласно условиям (2.64), каждое слагаемое в сумме (2.63) при этих условиях неотрицательно, т.е. сумма (2.63) неотрицательна, и
   - если минимальное значение этой суммы равно 0, то каждое слагаемое в этой сумме равно 0, т.е. объекты $\hat{w}$, $\hat{w}_0$, и $\hat{\lambda}$, решающие задачу минимизации (2.63) при условиях (2.64), удовлетворяют соотношениям (2.61) и (2.62), и
   - если минимальное значение этой суммы больше 0, то тогда решение задачи нахождения $\hat{w}$, $\hat{w}_0$, и $\hat{\lambda} = \{\hat{\lambda}_x \geq 0 \mid x \in X_S\}$, удовлетворяющих соотношениям (2.61) и (2.62), не существует (что по предположению невозможно). ■

Перепишем сумму (2.63) путем раскрытия скобок, перегруппировки слагаемых и использования линейности скалярного произведения:

$$\begin{aligned}
&\sum_{x\in X_S} \hat{\lambda}_x y_x \langle x, \hat{w}\rangle - \sum_{x\in X_S} \hat{\lambda}_x y_x \hat{w}_0 - \sum_{x\in X_S} \hat{\lambda}_x = \\
&= \sum_{x\in X_S} \langle \hat{\lambda}_x y_x x, \hat{w}\rangle - (\sum_{x\in X_S} \hat{\lambda}_x y_x)\hat{w}_0 - \sum_{x\in X_S} \hat{\lambda}_x = \\
&= \langle \sum_{x\in X_S} \hat{\lambda}_x y_x x, \hat{w}\rangle - (\sum_{x\in X_S} \hat{\lambda}_x y_x)\hat{w}_0 - \sum_{x\in X_S} \hat{\lambda}_x.
\end{aligned} \tag{2.65}$$

Из условий (2.64) следует, что (2.65) можно переписать в виде

$$\langle \hat{w}, \hat{w}\rangle - \sum_{x\in X_S} \hat{\lambda}_x = \|\hat{w}\|^2 - \sum_{x\in X_S} \hat{\lambda}_x. \tag{2.66}$$

Выражение (2.66) можно переписать, используя лишь переменные $\hat{\lambda}_x$:

$$\sum_{x,x'\in X_S} \hat{\lambda}_x \hat{\lambda}_{x'} y_x y_{x'} \langle x, x'\rangle - \sum_{x\in X_S} \hat{\lambda}_x. \tag{2.67}$$

Таким образом, исходная задача свелась к задаче нахождения набора

$$\hat{\lambda} = \{\hat{\lambda}_x \mid x \in X_S\}$$

минимизирующего значение выражения (2.67), при условиях

$$\forall\, x \in X_S \quad \hat{\lambda}_x \geq 0, \quad \sum_{x \in X_S} \hat{\lambda}_x y_x = 0.$$

Такая задача называется **задачей квадратичного программирования (ЗКП)**. Существует много алгоритмов решения этой задачи.

Искомый вектор $\hat{w}$ вычисляется по найденному решению $\hat{\lambda}$ данной ЗКП согласно первому равенству в (2.64). Для вычисления искомого $\hat{w}_0$ выбирается такая пара $x \in X_S$, что $\hat{\lambda}_x \neq 0$, в этом случае, согласно второму равенству в (2.62), должно быть верно равенство

$$y_x(\langle x, \hat{w}\rangle - \hat{w}_0) - 1 = 0,$$

из которого следует, что

$$\hat{w}_0 = \langle x, \hat{w}\rangle - y_x.$$

Если данная ЗКП имеет не единственное решение, то среди всех этих решений выбирается такое, что число $\hat{w}_0$, вычисленное по этому решению, удовлетворяет последнему неравенству в (2.64).

Обоснуем, почему $\exists\, x \in X_S : \hat{\lambda}_x \neq 0$. Если бы все числа $\hat{\lambda}_x$ были равны 0, то $\hat{w}$ – нулевой вектор, и из последнего неравенства в (2.64) следует, что $\forall\, x \in X_S \;\; -y_x\hat{w}_0 - 1 \geq 0$, или $-y_x\hat{w}_0 \geq 1$. Выборка S предполагается нетривиальной, т.е. y_x м.б. равно как 1, так и -1, откуда следует, что $\hat{w}_0 \geq 1$ и $-\hat{w}_0 \geq 1$, что невозможно. ■

2.5.3 Построение оптимальной разделяющей гиперплоскости по зашумленной выборке

В некоторых случаях выборка $S \subseteq \mathbf{R}^n \times \{-1, 1\}$ бывает зашумленной, т.е. значения компонентов векторов в S, представляющих объекты, могут немного отличаться от истинных значений. Также в S м.б. и ошибочно размеченные пары, т.е. пары (x, y_x) с неверным значением y_x. Это может привести к тому, что выборка S не будет линейно разделимой, т.е. невозможно найти АФ a_S вида

$$a_S(x) = sign\Big(\sum_{i=1}^{n} x^i w_i - w_0\Big) \tag{2.68}$$

такую, что $Q(a_S) = 0$. Тем не менее, иногда в ситуации зашумленности и линейной неразделимости выборки S все равно имеет смысл искать АФ a_S вида (2.68), допуская при этом небольшие ошибки классификации.

Один из подходов к построению АФ a_S такого вида называется **методом наименьших квадратов**, он будет рассмотрен в следующем параграфе. Данный подход заключается в том, чтобы найти АФ a_S вида (2.68) с наименьшим значением $Q(a_S)$, где

$$Q(a_S) = \sum_{x \in X_S} (a_S(x) - y_x)^2.$$

Другой подход является развитием подхода, изложенного в предыдущем пункте. Он заключается в том, чтобы построить разделяющую полосу максимальной ширины, допуская при этом попадание некоторых объектов не в свое полупространство.

Напомним, что если границами разделяющей полосы являются гиперплоскости, определяемые уравнениями

$$\langle x, w \rangle - w_0 = 1, \quad \langle x, w \rangle - w_0 = -1,$$

то $\forall\, x \in X_S$ точка x попадает в свое полупространство, если $M_x \geq 1$, где $M_x \stackrel{\text{def}}{=} y_x(\langle x, w \rangle - w_0)$.

Для адекватного определения целевой функции введем набор ξ дополнительных переменных:

$$\xi = \{\xi_x \mid x \in X_S\},$$

где $\forall\, x \in X_S$ значение переменной ξ_x будем понимать как величину ошибки аппроксимации на объекте x: она должна примерно соответствовать расстоянию от x до своего полупространства, когда x находится не в своем полупространстве (т.е. $M_x < 1$). Например, величину ошибки в этом случае можно определить как $1 - M_x$.

Задача построения оптимальной разделяющей полосы в данной ситуации имеет вид минимизации целевой функции

$$\frac{\|w\|^2}{2} + c \sum_{x \in X_S} \xi_x \quad \text{(где } c \text{ – некоторая константа)} \tag{2.69}$$

при условиях

$$\forall\, x \in X_S \quad \xi_x \geq 1 - M_x, \quad \xi_x \geq 0$$

Целевая функция (2.69) выражает следующие требования:

- разделяющая полоса должна быть пошире (т.е. значение $\|w\|$ должно быть поменьше),
- суммарная ошибка $\sum\limits_{x \in X_S} \xi_x$ должна быть поменьше.

Константа c позволяет регулировать баланс между требованиями

- максимизации ширины разделяющей полосы, и
- минимизации суммарной ошибки.

Обычно ее выбирают методом скользящего контроля:

- сначала задача решается при некотором c,
- затем из выборки удаляется небольшая доля объектов, имеющих наибольшую величину ошибки (такие объекты будут считаться или чрезмерно зашумленными, или ошибочно размеченными), а c изменяется следующим образом:
  - если ширина полосы получилась слишком маленькая, то c уменьшается (это приведет к увеличению ширины полосы),
  - если слишком много объектов находятся далеко от своего полупространства, то c увеличивается (полоса станет уже), и
- после этого задача решается заново (с новыми S и c).

  Возможно, придется проделать несколько таких итераций.

Функция Лагранжа для данной задачи имеет вид

$$L = \frac{\|w\|^2}{2} + c\sum_{x\in X_S}\xi_x - \sum_{x\in X_S}\lambda_x(M_x + \xi_x - 1) - \sum_{x\in X_S}\eta_x\xi_x,$$

и соотношение (2.48) имеет следующий вид:

- $\forall\, i = 1,\ldots,n \quad \frac{\partial L}{\partial w_i}(\hat{w},\hat{\lambda},\hat{\xi}) = \hat{w}_i - \sum\limits_{x\in X_S}\hat{\lambda}_x y_x x_i = 0,$
- $\frac{\partial L}{\partial w_0}(\hat{w},\hat{\lambda},\hat{\xi}) = \sum\limits_{x\in X_S}\hat{\lambda}_x y_x = 0,$
- $\forall\, x \in X_S \quad \frac{\partial L}{\partial \xi_x}(\hat{w},\hat{\lambda},\hat{\xi}) = c - \hat{\lambda}_x - \hat{\eta}_x = 0,$

что можно переписать в виде

$$\begin{cases} \hat{w} = \sum\limits_{x\in X_S}\hat{\lambda}_x y_x x, \\ \sum\limits_{x\in X_S}\hat{\lambda}_x y_x = 0, \\ \forall\, x \in X_S \quad \hat{\lambda}_x + \hat{\eta}_x = c. \end{cases} \tag{2.70}$$

Из теоремы Каруша-Куна-Таккера следует, что исходная задача сводится к задаче поиска наборов чисел

$$\hat{\lambda} = \{\hat{\lambda}_x \geq 0 \mid x \in X_S\}, \quad \hat{\eta} = \{\hat{\eta}_x \geq 0 \mid x \in X_S\},$$

а также вектора $\hat{w}$, числа $\hat{w}_0$, и набора чисел $\{\xi_x \mid x \in X_S\}$, удовлетворяющих равенствам (2.70) и условию

$$\forall\, x \in X_S \quad \begin{cases} \hat{\lambda}_x(y_x(\langle x, \hat{w}\rangle - \hat{w}_0) + \hat{\xi}_x - 1) = 0 \\ \hat{\eta}_x\hat{\xi}_x = 0 \\ y_x(\langle x, \hat{w}\rangle - \hat{w}_0) + \hat{\xi}_x - 1 \geq 0 \\ \hat{\xi}_x \geq 0 \end{cases} \tag{2.71}$$

Как и в предыдущем пункте, нахождение искомых наборов $\hat{\lambda}$ и $\hat{\eta}$ сводится к задаче минимизации выражения

$$\sum_{x \in X_S} \hat{\lambda}_x(y_x(\langle x, \hat{w}\rangle - \hat{w}_0) + \hat{\xi}_x - 1) + \sum_{x \in X_S} \hat{\eta}_x\hat{\xi}_x$$

которое, с учетом условий (2.70), можно переписать, используя лишь переменные $\hat{\lambda}_x$ и $\hat{\xi}_x$:

$$\sum_{x,x' \in X_S} \hat{\lambda}_x\hat{\lambda}_{x'}y_xy_{x'}\langle x, x'\rangle - \sum_{x \in X_S} \hat{\lambda}_x + c\sum_{x \in X_S} \hat{\xi}_x. \tag{2.72}$$

Нетрудно установить, что исходная задача, рассматриваемая в настоящем пункте, сводится к задаче минимизации (2.72) с условиями

$$\begin{cases} \sum\limits_{x \in X_S} \hat{\lambda}_x y_x = 0, \\ \forall\, x \in X_S \quad \begin{cases} 0 \leq \hat{\lambda}_x \leq c, \;\; \hat{\xi}_x \geq 0, \\ M_x + \hat{\xi}_x - 1 \geq 0, \end{cases} \end{cases} \tag{2.73}$$

где $M_x \stackrel{\text{def}}{=} y_x(\langle x, \hat{w}\rangle - \hat{w}_0)$, $\quad \hat{w} \stackrel{\text{def}}{=} \sum\limits_{(x,y_x) \in S} \hat{\lambda}_x y_x x$.

Эта задача – тоже ЗКП. В результате ее решения получаются оптимальные $\hat{\lambda}$, $\hat{\xi}$, $\hat{w}_0$, по которым можно вычислить оптимальные $\hat{w}$ и $\hat{\eta}$.

Отметим некоторые особенности оптимального решения $\hat{\lambda}, \hat{\eta}, \hat{\xi}, \hat{w}, \hat{w}_0$ исходной задачи. $\forall\, x \in X_S$ вектор x относится к одному из трех классов, в зависимости от значения M_x:

- если $M_x > 1$, то x находится в своем полупространстве, но не на его границе (такой вектор называется **периферийным**),

- если $M_x = 1$, то x находится в своем полупространстве, на его границе (такой вектор называется **опорным**),
- если $M_x < 1$, то x находится за пределами своего полупространства (такой вектор называется **выбросом**).

Согласно соотношениям в (2.71) и (2.73), $\forall\, x \in X_S$

- либо $\hat{\lambda}_x = 0$, $\hat{\eta}_x = c$, либо $\hat{\xi}_x = 1 - M_x$,
- либо $\hat{\lambda}_x = c$, $\hat{\eta}_x = 0$, либо $\hat{\xi}_x = 0$,
- $M_x + \hat{\xi}_x - 1 \geq 0$.

Поэтому

- если x – периферийный, т.е. $M_x > 1$, то невозможно, чтобы было верно равенство $\hat{\xi}_x = 1 - M_x$, поэтому для такого вектора $\hat{\lambda}_x = 0$, $\hat{\eta}_x = c$, откуда следует, что $\hat{\xi}_x = 0$,
- если $0 < \hat{\lambda}_x < c$, то $0 < \hat{\eta}_x < c$, $\hat{\xi}_x = 0$ и $M_x = 1$, т.е. x опорный,
- если x – выброс, т.е. $M_x < 1$, то
  - невозможно, чтобы было верно равенство $\hat{\lambda}_x = 0$, т.к. если бы оно было верно, то тогда было бы верно равенство $\hat{\xi}_x = 0$, поэтому $M_x - 1 \geq 0$, что противоречит неравенству $M_x < 1$,
  - невозможно, чтобы было верно неравенство $0 < \hat{\lambda}_x < c$, т.к. в этом случае $\hat{\xi}_x = 0$, что, как было установлено выше, неверно,

  т.е. остается единственная возможность: $\hat{\lambda}_x = c$, $\hat{\eta}_x = 0$, и $\hat{\xi}_x > 0$.

Читателю предлагается самостоятельно исследовать вопрос: возможно ли, чтобы x был опорный, но $\lambda_x = 0$ или c (если невозможно, то доказать это, а если возможно, то привести соответствующий пример).

2.6 Ядерный метод машинного обучения

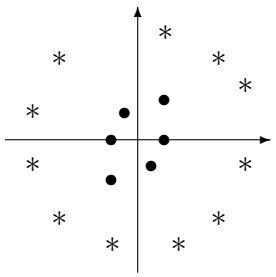
2.6.1 Спрямляющие пространства

В некоторых случаях выборка S линейно неразделима

- не по причинам зашумленности компонентов векторов в S, представляющих объекты, или ошибочной разметки,

- а по причине наличия нетривиальных зависимостей между компонентами векторов в S, представляющих объекты.

Например, рассмотрим выборку $S \subseteq \mathbf{R}^2 \times \{-1, 1\}$, изображенную на картинке (в которой мы представляем вектора из $\mathbf{R}^2$ точками плоскости)



где черные кружочки изображают объекты из S^+, а звездочки – объекты из S^-. Такая выборка принципиально линейно неразделима.

В данном случае принадлежность вектора $(x_1, x_2) \in \mathbf{R}^2$ к S^+ или S^- лучше определять по его норме $\|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$, т.е. искать a_S в виде

$$a_S(x) = sign\Big(\|x\| - w_0\Big).$$

Поиск АФ, соответствующих таким выборкам $S \subseteq \mathbf{R}^n \times \{-1, 1\}$, для которых невозможно построить АФ a_S в виде

$$a_S(x) = sign\Big(\sum_{i=1}^{n} x^i w_i - w_0\Big), \tag{2.74}$$

может делаться методом **спрямляющих пространств**, который заключается в следующем:

- выбирается подходящее нелинейное отображение

  $$\varphi : \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^N, \tag{2.75}$$

  с таким расчетом, чтобы выборка $S_\varphi \stackrel{\text{def}}{=} \{(\varphi(x), y_x) \mid x \in X_S\}$ оказалась бы линейно разделимой,
  ($\mathbf{R}^N$ в (2.75) называется **спрямляющим пространством**)

- методом опорных векторов для S_φ ищется АФ a_{S_φ} вида (2.74), и

- искомая АФ a_S определяется как композиция $a_{S_\varphi} \circ \varphi$.

Например, для описанного выше примера в качестве спрямляющего пространства можно взять $\mathbf{R}^2$, и $\varphi(x_1, x_2) \stackrel{\text{def}}{=} (x_1^2, x_2^2)$.

В других ситуациях рассматриваются функции $\varphi : \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^N$ вида

$$\varphi(x_1, \ldots, x_n) = (x_1, \ldots, x_n, x_1^2, \ldots, x_n^2, \ldots, x_i x_j, \ldots).$$

Нетрудно доказать, что для любой выборки S существует спрямляющее пространство – это м.б., например, пространство $\mathbf{R}^N$, где N – число элементов в S. Если выбрать в $\mathbf{R}^N$ ортонормированный базис, и определить $\varphi : \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^N$ как инъективное отображение, сопоставляющее каждому элементу $x \in X_S$ некоторый вектор из этого базиса, то S_φ будет линейно разделима.

Отметим важную особенность функции a_{S_φ}. Если S_φ линейно разделима, то, как было показано выше, a_{S_φ} можно искать в виде

$$\begin{aligned} a_{S_\varphi}(x) &= sign(\langle \varphi(x), \hat{w} \rangle - \hat{w}_0) = \\ &= sign(\langle \varphi(x), \sum_{x' \in X_S} \hat{\lambda}_{x'} y_{x'} \varphi(x') \rangle - \hat{w}_0) = \\ &= sign(\sum_{x' \in X_S} \hat{\lambda}_{x'} y_{x'} \langle \varphi(x), \varphi(x') \rangle - \hat{w}_0), \end{aligned} \tag{2.76}$$

где $\hat{\lambda}$ ищется как решение задачи минимизации выражения

$$\sum_{x, x' \in X_S} \hat{\lambda}_x \hat{\lambda}_{x'} y_x y_{x'} \langle \varphi(x), \varphi(x') \rangle - \sum_{x \in X_S} \hat{\lambda}_x \tag{2.77}$$

при условиях

$$\forall\, x \in X_S \quad \hat{\lambda}_x \geq 0, \quad \sum_{x \in X_S} \hat{\lambda}_x y_x = 0. \tag{2.78}$$

Из (2.76) и (2.77) следует, что для построения a_{S_φ} не надо знать

- ни размерности спрямляющего пространства,
- ни векторов вида $\varphi(x)$, где $x \in X_S$,

надо лишь знать скалярные произведения вида $\langle \varphi(x), \varphi(x') \rangle$.

Ядерный метод ML заключается в том, что построение АФ a_S делается методом, аналогичным описанному выше, но с заменой всех скалярных произведений $\langle \varphi(x), \varphi(x') \rangle$ на выражения вида $K(x, x')$, где K – функция вида

$$K : \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}.$$

Данная функция называется **ядром**. Она определяется для S методом подбора, и должна обладать следующими свойствами:

- **симметричность**:

$$\forall\, x, x' \in \mathbf{R}^n \quad K(x, x') = K(x', x), \tag{2.79}$$

- **положительная определенность**:

$$\forall\, x_1, \ldots, x_m \in \mathbf{R}^n, \;\; \forall\, \alpha_1, \ldots, \alpha_m \in \mathbf{R} \quad \sum_{i,j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j K(x_i, x_j) \geq 0. \tag{2.80}$$

Построение АФ a_S сводится к задаче минимизации выражения

$$\sum_{x,x' \in S} \hat{\lambda}_x \hat{\lambda}_{x'} y_x y_{x'} K(x, x') - \sum_{x \in X_S} \hat{\lambda}_x, \tag{2.81}$$

при условиях (2.78). Искомая АФ a_{S_φ} определяется следующим образом:

$$\forall\, x \in \mathbf{R}^n \;\; a_{S_\varphi}(x) = sign\Big(\sum_{x' \in X_S} \hat{\lambda}_{x'} y_{x'} K(x, x') - \hat{w}_0 \Big),$$

где $\hat{w}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \sum\limits_{x' \in X_S} \hat{\lambda}_{x'} y_{x'} K(x'', x') - y_{x''}$, и x'' – произвольный вектор из X_S, такой, что $\hat{\lambda}_{x''} \neq 0$.

В общем случае ядро определяется как произвольная функция вида

$$K : X \times X \to \mathbf{R} \tag{2.82}$$

(где X – множество, элементами которого являются объекты), являющаяся симметричной и положительно определенной, т.е. верны аналоги соотношений (2.79) и (2.80), в которых аргументами K являются элементы множества X.

Нетрудно доказать, что если K – ядро вида (2.82), то

- $\forall\, x \in X \;\; K(x, x) \geq 0$,
- если $\forall\, x \in X \;\; K(x, x) = 0$, то $\forall\, x, x' \in X \;\; K(x, x') = 0$,
- верен аналог неравенства Коши-Буняковского:

$$\forall\, x, x' \in X \quad K(x, x') \leq \sqrt{K(x, x) K(x', x')}.$$

2.6.2 Примеры ядер

$K(x, x')$ может иметь, например, следующий вид:

- $(c\langle x, x'\rangle + d)^m$, где $c, d \in \mathbf{R}_{\geq 0},\ m \geq 0$ (полиномиальное ядро), (где $\mathbf{R}_{\geq 0}$ – множество неотрицательных действительных чисел),
- $\sigma(c\langle x, x'\rangle + d)$, где σ – сигмоида (сигмоидное ядро),
- $a_0 + \sum\limits_{n\geq 0} a_n \sin(nx)\sin(nx') + \sum\limits_{n\geq 0} b_n \cos(nx)\cos(nx')$, где $\sum\limits_{n\geq 1} a_n^2 + b_n^2 < \infty$ (ядро Фурье),
- $\exp(-\frac{\|x-x'\|^2}{\sigma^2})$ (гауссово ядро),
- $\exp(\frac{\langle x,x'\rangle}{\sigma^2})$ (экспоненциальное ядро),
- $K_1(x, x')K_2(x, x')$, где K_1 и K_2 – ядра,
- $\alpha_1 K_1(x, x') + \alpha_2 K_2(x, x')$, где K_1 и K_2 – ядра, α_1 и $\alpha_2 \in \mathbf{R}_{\geq 0}$,
- $K(\varphi(x), \varphi(x'))$, где K – ядро, φ – произвольная функция.

Приведем еще три примера ядра.

1. В качестве ядра $X \times X \to \mathbf{R}$ может выступать функция вида

$$(x, x') \mapsto \langle \varphi(x), \varphi(x')\rangle$$

где φ – произвольная функция вида

$$\varphi : X \to \mathcal{H},$$

и $\mathcal{H}$ – спрямляющее пространство, которое является **гильбертовым пространством**, т.е.

- $\mathcal{H}$ – линейное пространство со скалярным произведением, напомним, что **скалярное произведение** на $\mathcal{H}$ – это функция, сопоставляющая каждой паре $(x, y) \in \mathcal{H} \times \mathcal{H}$ действительное число $\langle x, y\rangle$, и обладающая свойствами: $\forall\, x, x', y \in \mathcal{H}$
  - $\forall\, \alpha, \alpha' \in \mathbf{R}\ \ \langle \alpha x + \alpha' x', y\rangle = \alpha\langle x, y\rangle + \alpha'\langle x', y\rangle$,
  - $\langle x, y\rangle = \langle y, x\rangle$,
  - $\langle x, x\rangle \geq 0$, причем $\langle x, x\rangle = 0 \ \Leftrightarrow\ x = \bar{0}$ (нулевой вектор),

- $\mathcal{H}$ – **полное** метрическое пространство (где метрика ρ на $\mathcal{H}$ определяется нормой: $\rho(x, x') = \|x - x'\|$, а норма определяется скалярным произведением: $\|x\|^2 = \langle x, x\rangle$), т.е. $\forall$ фундаментальная последовательность имеет предел в $\mathcal{H}$,
- $\mathcal{H}$ – **сепарабельное** пространство, т.е. $\exists$ счетное подмножество $H \subseteq \mathcal{H}$: $\forall\, \varepsilon > 0,\ \forall\, h \in \mathcal{H}\ \ \exists\, h' \in H : \rho(h, h') < \varepsilon$.

Примеры гильбертовых пространств: $\mathbf{R}^n$ или l_2, где

$$l_2 = \{(x_1, x_2, \ldots) \mid \sum_{i \geq 1} x_i^2 < \infty\},$$

скалярное произведение в l_2 имеет вид

$$\langle (x_1, x_2, \ldots), (y_1, y_2, \ldots)\rangle = \sum_{i \geq 1} x_i y_i.$$

2. Если K – ядро вида $X \times X \to \mathbf{R}$, где X – произвольное множество, то функция

$$K' : \mathcal{P}_{fin}(X) \times \mathcal{P}_{fin}(X) \to \mathbf{R}$$

(где $\mathcal{P}_{fin}(X)$ – множество всех конечных подмножеств X), определяемая следующим образом:

$$\forall\, A, B \in \mathcal{P}_{fin}(X) \quad K'(A, B) = \sum_{a \in A, b \in B} K(a, b)$$

тоже является ядром.

3. Пусть заданы алфавит (т.е. множество символов) A, целое число $n \geq 1$, и действительное число $\lambda \in (0, 1]$.

Обозначим записью n^* множество всех последовательностей

$$\bar{i} = (i_1, \ldots, i_k), \quad \text{где } 1 \leq i_1 < \ldots < i_k \leq n. \tag{2.83}$$

Если последовательность $\bar{i} \in n^*$ имеет вид (2.83), то

- запись $l(\bar{i})$ обозначает число $i_k - i_1 + 1$, и
- для каждой цепочки $x \in A^n$, если x имеет вид $a_1 \ldots a_n$, то запись $x[\,\bar{i}\,]$ обозначает цепочку $a_{i_1} \ldots a_{i_k}$.

Обозначим символом $\mathcal{H}$ гильбертово пространство функций вида

$$f : A^n \to \mathbf{R},$$

скалярное произведение на $\mathcal{H}$ определяется следующим образом:

$$\langle f, g\rangle = \sum_{y\in A^n} f(y)g(y).$$

Ядро $K_n : A^n \times A^n \to \mathbf{R}$ определяется соотношением

$$\forall\, x, x' \in A^n \quad K_n(x, x') = \langle\varphi(x), \varphi(x')\rangle,$$

где $\varphi : A^n \to \mathcal{H}$, $\forall\, x \in A^n \;\; \varphi(x) : A^n \to \mathbf{R}$, $y \mapsto \sum\limits_{\bar{i}\in n^*: y=x[\,\bar{i}\,]} \lambda^{l(\bar{i})}$.

K_n используется в задачах анализа естественно-языковых текстов.

2.6.3 Каноническое гильбертово пространство, определяемое ядром

Каждому ядру $K : X^2 \to \mathbf{R}$ соответствует **каноническое гильбертово пространство**, определяемое ядром K. Данное пространство обозначается записью $\mathcal{H}_K$ и обладает следующим свойством: $\exists\,\varphi : X \to \mathcal{H}_K$:

$$\forall\, x, x' \in X \quad K(x, x') = \langle\varphi(x), \varphi(x')\rangle. \tag{2.84}$$

$\mathcal{H}_K$ определяется как подпространство линейного пространства $\mathbf{R}^X$ функций вида $X \to \mathbf{R}$ следующим образом:

- $\forall\, x \in X$ обозначим записью K_x функцию из $\mathbf{R}^X$, которая отображает каждый $x' \in X$ в $K(x, x')$,
- обозначим символом $\mathcal{F}_X$ линейное подпространство в $\mathbf{R}^X$, порожденное всеми функциями вида K_x, т.е.

$$\mathcal{F}_X = \{\sum_{i=1..n} \alpha_i K_{x_i} \mid n \geq 1, \forall\, i = 1, \ldots, n \;\; \alpha_i \in \mathbf{R}, x_i \in X\},$$

- определим скалярное произведение на $\mathcal{F}_X$: если f, g из $\mathcal{F}_X$ имеют вид $f = \sum\limits_{i=1..n} \alpha_i K_{x_i}$ и $g = \sum\limits_{j=1..m} \beta_j K_{x'_j}$, то

$$\langle f, g\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1..n, j=1..m} \alpha_i\beta_j K(x_i, x'_j) = \sum_{i=1..n} \alpha_i g(x_i) = \sum_{j=1..m} \beta_j f(x'_j),$$

заметим, что из этого определения следует свойство

$$\forall\, x, x' \in X \quad \langle K_x, K_{x'}\rangle = K(x, x') = K_x(x') = K_{x'}(x), \tag{2.85}$$

- $\mathcal{H}_K$ определяется как пополнение $\mathcal{F}_X$ в метрике ρ, задаваемой скалярным произведением:

$$\forall\, f, g \in \mathcal{F}_X \quad \rho(f,g) = \|f-g\| = \sqrt{\langle f-g, f-g\rangle},$$

- скалярное произведение на $\mathcal{H}_K$ определяется следующим образом: $\forall\, f, g \in \mathcal{H}_K$, если $f = \lim\limits_{n\to\infty} f_n$ и $g = \lim\limits_{n\to\infty} g_n$, где $\forall\, n \geq 1$ $f_n, g_n \in \mathcal{F}_X$, то

$$\langle f, g\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{n\to\infty} \langle f_n, g_n\rangle$$

(нетрудно доказать, что данный предел существует и не зависит от выбора последовательностей (f_n) и (g_n), сходящихся к f и g соответственно).

Функция $\varphi : X \to \mathcal{H}_K$ определяется как отображение $x \mapsto K_x$. Свойство (2.84) следует из определения функции φ и соотношения (2.85).

Нетрудно доказать, что

- $\forall\, f \in \mathcal{H}_K$, $\forall\, x \in X$

$$\begin{array}{l} f(x) = \langle f, K_x\rangle, \\ |f(x)| \leq \|f\| \sqrt{K(x,x)}, \end{array} \tag{2.86}$$

неравенство в (2.86) верно потому, что оно эквивалентно неравенству Коши-Буняковского

$$|\langle f, K_x\rangle| \leq \|f\| \sqrt{\langle K_x, K_x\rangle},$$

- $\forall\, x \in X$ функционал $\mathcal{H}_K \to \mathbf{R} : f \mapsto f(x)$ непрерывен, т.е.

$$f = \lim_{n\to\infty} f_n \quad \Rightarrow \quad f(x) = \lim_{n\to\infty} f_n(x),$$

это можно обосновать с использованием свойства

$$\forall\, f, f' \in \mathcal{H}_K,\ \forall\, x \in X \quad |f(x) - f'(x)| \leq \|f - f'\| \sqrt{K(x,x)},$$

которое следует из неравенства в (2.86). ■

Теорема 5.
Пусть заданы

- выборка $S \subseteq X \times \mathbf{R}$,

- ядро $K : X^2 \to \mathbf{R}$,
- функция потерь $c : (X \times \mathbf{R} \times \mathbf{R})^* \to \mathbf{R}_{\geq 0}$
  (например, $c\Big((x_i, y_i, f(x_i))_{i=1..l}\Big) = \frac{1}{l}\sum\limits_{i=1}^{l}(y_i - f(x_i))^2$), и
- строго возрастающая функция $\Omega : \mathbf{R}_{\geq 0} \to \mathbf{R}_{\geq 0}$.

Если $\hat{f} \in \mathcal{H}_K$ – решение задачи

$$c\Big((x_i, y_i, f(x_i))_{i=1..l}\Big) + \Omega(\|f\|) \to \min \tag{2.87}$$

то $\hat{f} = \sum\limits_{i=1}^{l} \alpha_i K_{x_i}$, где $\alpha_1, \ldots, \alpha_l \in \mathbf{R}$.

Доказательство.
Вектор $\hat{f} \in \mathcal{H}_K$ можно представить в виде суммы

$$\hat{f} = \sum_{j=1}^{l} \alpha_j K_{x_j} + f^*,$$

где f^* – вектор из ортогонального дополнения подпространства в $\mathcal{H}_K$, порожденного векторами $K_{x_1}, \ldots, K_{x_l}$, т.е.

$$\forall\, i = 1, \ldots, l \;\; \langle f^*, K_{x_i} \rangle = 0. \tag{2.88}$$

Согласно равенству в (2.86) и соотношению (2.88), $\forall\, i = 1, \ldots, l$

$$\hat{f}(x_i) = \langle \hat{f}, K_{x_i} \rangle = \langle \sum_{j=1}^{l} \alpha_j K_{x_j}, K_{x_i} \rangle + \langle f^*, K_{x_i} \rangle = \sum_{j=1}^{l} \alpha_j K(x_j, x_i),$$

откуда следует, что $\hat{f}(x_i)$ не зависит от f^*, поэтому первое слагаемое в сумме в (2.87) не зависит от f^*.

Докажем, что $f^* = \bar{0}$ (нулевой вектор). Если $f^* \neq \bar{0}$, то замена f^* на $\bar{0}$ не изменила бы первое слагаемое в сумме в (2.87), а второе бы только уменьшилось, т.к. $\forall\, f_1, f_2 \in \mathcal{H}_K$ если $\langle f_1, f_2 \rangle = 0$, то

$$\|f_1 + f_2\|^2 = \langle f_1 + f_2, f_1 + f_2 \rangle = \langle f_1, f_1 \rangle + \langle f_2, f_2 \rangle = \|f_1\|^2 + \|f_2\|^2$$

поэтому $\|\hat{f}\|^2 = \|\sum\limits_{i=1}^{l} \alpha_i K_{x_i}\|^2 + \|f^*\|^2 > \|\sum\limits_{i=1}^{l} \alpha_i K_{x_i}\|^2$, откуда следует неравенство

$$\Omega(\|\hat{f}\|) > \Omega(\|\sum_{i=1}^{l} \alpha_i K_{x_i}\|)$$

которое противоречит предположению о том, что $\hat{f}$ – решение задачи (2.87). ■

2.7 Задача регрессии

В **задаче регрессии** выборка, как правило, имеет вид

$$S = \{(x_1, y_1), \ldots, (x_l, y_l)\} \subseteq \mathbf{R}^n \times \mathbf{R},$$

т.е. ответами являются действительные числа (м.б. также и вектора из действительных чисел). Задача регрессии заключается в том, чтобы по известным значениям y_i некоторой неизвестной функции в заданных точках x_i $(i = 1, \ldots, l)$ предсказать значения этой функции в других точках.

2.7.1 Линейная регрессия

Пусть задана выборка $S = \{(x_1, y_1), \ldots, (x_l, y_l)\} \subseteq \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}$.

Требуется найти АФ $a_S(x)$ в виде $\langle x, w\rangle + w_0$, где $w \in \mathbf{R}^n, w_0 \in \mathbf{R}$, причем должно быть выполнено условие

$$Q(a_S) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} \mathcal{L}(a_S, x_i) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}(a_S(x_i) - y_i)^2 \to \min\,.$$

Поскольку множитель $\frac{1}{l}$ не влияет на решение задачи поиска оптимальной АФ a_S, то мы его писать не будем.

Заметим, что

$$a_S(x_i) = \langle x_i, w\rangle + w_0 = \langle \tilde{x}_i, \tilde{w}\rangle,$$

где $\tilde{w} = (w, w_0)$ и $\tilde{x}_i = (x_i, 1)$.

Таким образом, требуется найти $\tilde{w} \in \mathbf{R}^{n+1}$, решающий задачу

$$Q(\tilde{w}) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{l}(\langle \tilde{x}_i, \tilde{w}\rangle - y_i)^2 \to \min \tag{2.89}$$

Обозначим символами X и Y матрицу и столбец соответственно

$$X = \begin{pmatrix} \tilde{x}_1 \\ \ldots \\ \tilde{x}_l \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \ldots \\ y_l \end{pmatrix}.$$

Если рассматривать $\tilde{w}$ как столбец, то можно переписать (2.89) в виде

$$Q(\tilde{w}) = \|X\tilde{w} - Y\|^2 \to \min \tag{2.90}$$

$Q(\tilde{w})$ – выпуклая функция, т.к. она является суперпозицией выпуклой функции $\tilde{w} \mapsto \|X\tilde{w} - Y\|$ и выпуклой функции $x \mapsto x^2$, причем вторая

функция возрастает. Выпуклость второй из этих функций была обоснована в пункте 2.5.2, выпуклость первой обосновывается следующим образом: $\forall\, \alpha \in [0,1],\ \forall\, \tilde{w}, \tilde{w}' \in \mathbf{R}^{n+1}$

$$\begin{aligned}
&\|X(\alpha\tilde{w} + (1-\alpha)\tilde{w}') - Y\| = \\
&= \|X(\alpha\tilde{w} + (1-\alpha)\tilde{w}') - \alpha Y - (1-\alpha)Y\| = \\
&= \|\alpha(X\tilde{w} - Y) + (1-\alpha)(X\tilde{w}' - Y)\| \leq \\
&\leq \alpha\|X\tilde{w} - Y\| + (1-\alpha)\|X\tilde{w}' - Y\|.
\end{aligned}$$

Поэтому $\tilde{w}$ является решением задачи (2.90) если и только если

$$\forall\, j = 1, \ldots, n+1 \quad \frac{\partial Q}{\partial \tilde{w}_j} = 0. \tag{2.91}$$

Учитывая определение функции Q, перепишем (2.91) в виде

$$\forall\, j = 1, \ldots, n+1 \quad \frac{\partial Q}{\partial \tilde{w}_j} = \sum_{i=1}^{l} 2(\langle \tilde{x}_i, \tilde{w}\rangle - y_i)(\tilde{x}_i)_j = 0 \tag{2.92}$$

Поскольку $\forall\, i = 1, \ldots, l,\ \forall\, j = 1, \ldots, n+1$ $(\tilde{x}_i)_j$ есть элемент X_{ij} матрицы X, то соотношения (2.92) можно переписать в виде

$$\forall\, j = 1, \ldots, n+1 \quad \sum_{i=1}^{l} \langle \tilde{x}_i, \tilde{w}\rangle X_{ij} = \sum_{i=1}^{l} y_i X_{ij}. \tag{2.93}$$

Обозначим записью $X^\top$ матрицу, транспонированную к X, т.е.

$$\forall\, j = 1, \ldots, n+1,\ \forall\, i = 1, \ldots, l \quad X^\top_{ji} = X_{ij},$$

и перепишем (2.93) в виде

$$\forall\, j = 1, \ldots, n+1 \quad \sum_{i=1}^{l} X^\top_{ji} \langle \tilde{x}_i, \tilde{w}\rangle = \sum_{i=1}^{l} X^\top_{ji} y_i. \tag{2.94}$$

$\forall\, i = 1, \ldots, l$ $\langle \tilde{x}_i, \tilde{w}\rangle$ есть i–й элемент столбца $X\tilde{w}$, обозначим его записью $(X\tilde{w})_i$. Нетрудно видеть, что $\forall\, j = 1, \ldots, n+1$

- левая сумма в (2.94), т.е. $\sum\limits_{i=1}^{l} X^\top_{ji}(X\tilde{w})_i$, есть j–й элемент столбца $X^\top(X\tilde{w})$, и
- правая сумма в (2.94) есть j–й элемент столбца $X^\top Y$.

Таким образом, столбцы $X^\top X\tilde{w}$ и $X^\top Y$ совпадают, т.е. искомый вектор $\tilde{w}$ является решением уравнения

$$X^\top X\tilde{w} = X^\top Y. \tag{2.95}$$

Нетрудно доказать, что данное уравнение всегда имеет решение.

Если матрица $X^\top X$ невырождена, то уравнение (2.95) имеет единственное решение

$$\tilde{w} = (X^\top X)^{-1}X^\top Y,$$

а если она вырождена, то решение уравнения (2.95) м.б. неединственным. Так может произойти, например, если число l пар в обучающей выборке S меньше n. В этом случае вместо задачи (2.90) разумнее решать задачу

$$Q(\tilde{w}) = \|X\tilde{w} - Y\|^2 + c\|\tilde{w}\|^2 \to \min, \tag{2.96}$$

где c – параметр, выражающий штраф за большую $\|\tilde{w}\|$.

Данная задача называется задачей **гребневой (ridge) регрессии**.

Поскольку минимизируемая функция Q в (2.96) является выпуклой и дифференцируемой, то искомое решение должно обращать в 0 все частные производные функции Q:

$$\forall\, j = 1, \ldots, n+1 \quad \frac{\partial Q}{\partial \tilde{w}_j} = \sum_{i=1}^{l} 2(\langle \tilde{x}_i, \tilde{w}\rangle - y_i)(\tilde{x}_i)_j + 2c\tilde{w}_j = 0.$$

Это соотношение можно переписать в виде

$$\forall\, j = 1, \ldots, n+1 \quad \sum_{i=1}^{l}(\langle \tilde{x}_i, \tilde{w}\rangle - y_i)X_{ij} + c\tilde{w}_j = 0. \tag{2.97}$$

Нетрудно доказать, что $\forall\, j = 1, \ldots, n+1$

- первое слагаемое в (2.97), т.е. $\sum\limits_{i=1}^{l}(\langle \tilde{x}_i, \tilde{w}\rangle - y_i)X_{ij}$, есть j–й элемент столбца $X^\top X\tilde{w} - X^\top Y$, и
- слагаемое $c\tilde{w}_j$ в (2.97) есть j–й элемент столбца $c\tilde{w}$.

Поэтому искомый вектор $\tilde{w}$ является решением уравнения

$$X^\top X\tilde{w} - X^\top Y + c\tilde{w} = 0^\downarrow \quad (\text{где } 0^\downarrow \text{ – нулевой столбец порядка } n+1),$$

которое можно переписать в виде

$$(X^\top X + cE)\tilde{w} = X^\top Y \quad (\text{где } E \text{ – единичная матрица порядка } n+1).$$

Нетрудно доказать, что матрица $X^\top X + cE$ невырождена $\forall\, c > 0$.

Таким образом, решение задачи гребневой регрессии имеет вид

$$\tilde{w} = (X^\top X + cE)^{-1}X^\top Y.$$

2.8 Метрическая модель обучения

Метрическая модель обучения связана с использованием некоторой меры близости ρ на множестве объектов X, которую называют **метрикой**. Метрика ρ должна быть подобрана так, чтобы зависимость $f : X \to Y$ между объектами и ответами (которую аппроксимирует АФ a_S) была согласована с ρ, т.е. если объекты x и x' близки по этой метрике, то ответы $f(x)$ и $f(x')$ были бы примерно одинаковы.

Во многих задачах метрический подход существенно проще, чем рассмотренный выше подход, основанный на описании объектов в виде векторов значений признаков. Применение метрической модели более предпочтительно по сравнению с другими моделями в тех случаях, когда объекты имеют сложную структуру (например, это м.б. изображения, временные ряды, структуры белков, и т.п.).

2.8.1 Понятие метрики

Метрикой на множестве X называется функция

$$\rho : X \times X \to \mathbf{R}_{\geq 0},$$

удовлетворяющая условию: $\forall\, x, x' \in X \quad \begin{cases} \rho(x, x') = 0 \quad \Leftrightarrow \quad x = y', \\ \rho(x, x') = \rho(x', x). \end{cases}$

В некоторых случаях ρ может также удовлетворять условию

$$\forall\, x, x', x'' \in X \quad \rho(x, x'') \leq \rho(x, x') + \rho(x', x'')$$

(которое называется **неравенством треугольника**).

Примеры метрики:

- **евклидова метрика** на $X = \mathbf{R}^n$:

$$\forall\, x, x' \in \mathbf{R}^n \quad \rho(x, x') = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - x'_i)^2},$$

  где $x = (x_1, \ldots, x_n), x' = (x'_1, \ldots, x'_n)$,

- **взвешенная метрика** на $X = \mathbf{R}^n$: предполагается, что заданы веса $w_1, \ldots, w_n \in \mathbf{R}_{\geq 0}$ и действительное число $p \geq 1$,

$$\forall\, x, x' \in \mathbf{R}^n \quad \rho(x, x') = \Big(\sum_{i=1}^{n} w_i |x_i - x'_i|^p \Big)^{\frac{1}{p}},$$

где $x = (x_1, \ldots, x_n), x' = (x'_1, \ldots, x'_n)$,
(евклидова метрика является частным случаем взвешенной метрики: в ней $p = 2$ и $\forall\, i = 1, \ldots, n \;\; w_i = 1$),

- метрика на множестве символьных строк C^*, где C – конечное множество, элементы которого называются **символами**: $\forall\, x, x' \in C^*$ $\rho(x, x')$ равно наименьшему числу элементарных операций, которые надо выполнить чтобы получить x' из x, где под **элементарной операцией** понимается
  - удаление какого-либо символа из строки, или
  - вставка какого-либо символа в произвольное место строки.

2.8.2 Метод ближайших соседей

Пусть задана обучающая выборка $S \subseteq X \times Y$.

Напомним, что X_S обозначает множество объектов, входящих в S:

$$X_S \stackrel{\text{def}}{=} \{x \in X \mid \exists\, y_x \in Y : (x, y_x) \in S\}.$$

Если на множестве X объектов задана метрика ρ, то $\forall\, x \in X$ объекты из множества X_S можно упорядочить в соответствии с их близостью к x, т.е. расположить в последовательность

$$x_1, \ldots, x_{|S|}, \tag{2.98}$$

удовлетворяющую условию:

$$\rho(x, x_1) \leq \ldots \leq \rho(x, x_{|S|}) \tag{2.99}$$

т.е. первым в (2.98) расположен ближайший к x объект, затем – следующий по близости к x объект, и т.д. $\forall\, i = 1, \ldots, l$ объект x_i из последовательности (2.98) называется i–**м ближайшим соседом к** x.

Метод ближайших соседей для построения АФ a_S заключается в том, что выбираются

- натуральное число $k \geq 1$ (число ближайших к x объектов, ответы на которых учитываются при вычислении ответа $a_S(x)$),
- действительные числа $w_1 \geq \ldots \geq w_k > 0$, которые имеют смысл весов, определяющих вклад ближайших k соседей объекта x из обучающей выборки S в вычисление ответа для объекта x, например,

$$\forall\, i = 1, \ldots, k \quad w_i = \frac{k + 1 - i}{k} \quad \text{или} \quad w_i = q^i,$$

где $0 < q < 1$ – заданный параметр,

$\forall\, x \in X$ значение $a_S(x)$ определяется как такой ответ $y \in Y$, который максимизирует значение выражения

$$\sum_{i=1}^{k} [\![y_{x_i} = y]\!] w_i, \tag{2.100}$$

т.е. как такой ответ y, который наиболее характерен среди ответов на k ближайших соседей x из обучающей выборки S.

АФ, построенную в соответствии с приведенным выше определением, будем обозначать записью a_S^k, явно указывая число k ближайших соседей. Оптимальным является такое k, которое минимизирует риск

$$\sum_{(x,y_x)\in S} [\![a^k_{S\setminus\{(x,y_x)\}}(x) \neq y_x]\!].$$

2.8.3 Метод окна Парзена

В **методе окна Парзена (МОП)** используется

- параметр $h > 0$, называемый **шириной окна**, и
- невозрастающая функция $K(r) : \mathbf{R}_{\geq 0} \to \mathbf{R}_{\geq 0}$, называемая **ядром**.

Примеры ядер, используемых в МОП: $[\![r \leq 1]\!]$, $(1 - r^2)[\![r \leq 1]\!]$, e^{-r^2}.

АФ a_S, построенная по МОП, определяется почти так же, как в предыдущем пункте, со следующем отличием: вместо выражения (2.100) используется выражение

$$\sum_{i=1}^{|S|} [\![y_{x_i} = y]\!] K\Big(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\Big).$$

АФ, построенную в соответствии с приведенным выше определением, будем обозначать записью a_S^h, явно указывая ширину окна h. Оптимальным является такое h, которое минимизирует риск

$$\sum_{(x,y_x)\in S} [\![a^h_{S\setminus\{(x,y_x)\}}(x) \neq y_x]\!].$$

Ширина окна h может быть не константой, а функцией, зависящей от количества объектов из X_S, находящихся вблизи x.

2.8.4 Метод потенциалов

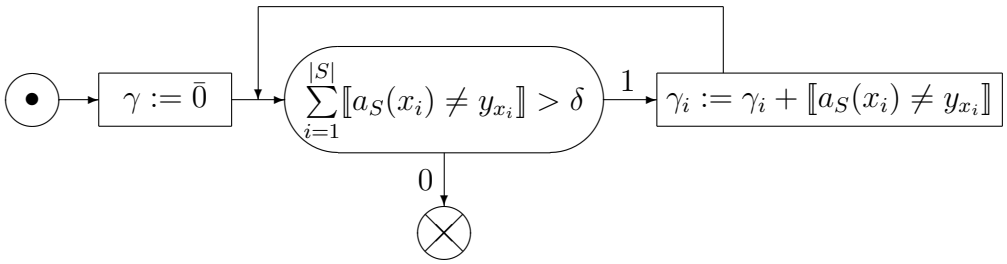
В **методе потенциалов** используются следующие параметры:

- размеры окон $h_1, \ldots, h_{|S|} > 0$,
- порог ошибки $\delta \geq 0$, и
- ядро $K(r)$.

АФ a_S, построенная по методу потенциалов, определяется почти так же, как в пункте 2.8.2, со следующем отличием: вместо выражения (2.100) используется выражение

$$\sum_{i=1}^{|S|} [\![y_{x_i} = y]\!] \gamma_i K\Big(\frac{\rho(x, x_i)}{h_i}\Big),$$

в котором $\gamma_i \geq 0$ – веса, настраиваемые по следующему алгоритму:



где

- $\gamma = (\gamma_1, \ldots, \gamma_{|S|})$,
- $\bar{0}$ – вектор размерности $|S|$, все компоненты которого равны 0, и
- при каждом выполнении оператора в правом прямоугольнике индекс i выбирается равновероятно из множества $\{1, \ldots, |S|\}$.

При $Y = \{-1, +1\}$ можно понимать

- объекты из X_S как положительные и отрицательные заряды,
- коэффициенты γ_i как абсолютные величины этих зарядов,
- $K(r)$ как зависимость потенциала от расстояния до заряда,
- значение $a_S(x)$ как знак потенциала в точке x.

2.8.5 Метод эталонов

В этом пункте рассматривается задача построения по обучающей выборке S АФ a_S по следующему принципу:

- $\forall\, x \in X$ элементы множества X_S располагаются в последовательность $x_1, \ldots, x_{|S|}$, удовлетворяющую условию (2.99), и
- значение $a_S(x)$ определяется как такой ответ $y \in Y$, который максимизирует значение выражения

$$(x \underset{S}{\mapsto} y) = \sum_{i=1}^{|S|} [\![y_{x_i} = y]\!]\, w(i, x), \tag{2.101}$$

  где $\forall\, i = 1, \ldots, |S| \quad w(i, x)$ – заданное число, выражающее степень важности i–го ближайшего соседа x (т.е. x_i) для вычисления $a_S(x)$.

Значение (2.101) можно интерпретировать как

- меру уверенности в том, что АФ a_S отображает x именно в y, или
- меру близости $a_S(x)$ к y.

$\forall\, x \in X_S$ сопоставим объекту x число $M_S(x)$, называемое **типичностью** объекта x, и определяемое следующим образом:

$$M_S(x) = (x \underset{S}{\mapsto} y_x) - \max_{y \in Y \setminus y_x} (x \underset{S}{\mapsto} y).$$

Говоря неформально, $M_S(x)$ выражает меру правдоподобия утверждения о том, что значением $a_S(x)$ является именно y_x.

Каждому объекту $x \in X_S$ можно сопоставить один из четырех перечисляемых ниже типов, в соответствии со значением $M_S(x)$:

- x – **эталон**, если значение $M_S(x)$ – большое положительное,
- x – **периферийный** (или **неинформативный**) объект, если $M_S(x)$ – положительное, но не такое большое, как у эталонов,
- x – **пограничный** объект, если $M_S(x)$ близко к 0,
- x – **выброс** (т.е. зашумленный, или ошибочно размеченный объект), если $M_S(x) < 0$.

Для нахождения оптимальной АФ a_S рекомендуется строить её не по всей выборке S, а по ее подвыборке $\hat{S}$, содержащей только эталоны.

$\hat{S}$ строится при помощи излагаемого ниже алгоритма, в котором используются следующие параметры:

- δ – порог фильтрации выбросов,
- l_0 – допустимая доля ошибок.

Алгоритм состоит из перечисляемых ниже действий.

- Из S удаляются все пары (x, y_x), такие, что $M_S(x) < \delta$.

  Ниже под S понимается не исходная выборка, а результат этого удаления.

- $\forall\, y \in Y$ в $\hat{S}$ зачисляется такая пара $(x^*, y) \in S$, что значение $M_S(x^*)$ максимально среди $\{M_S(x) \mid x \in X_S, (x, y) \in S\}$.

- Далее выполняются итерации, состоящие из перечисляемых ниже действий. Итерации заканчиваются, если $\hat{S}$ станет равно S.

  – $E := \{(x, y) \in S \setminus \hat{S} : M_{\hat{S}}(x) < 0\}$,
  – если $|E| < l_0$ то выход,
  – иначе $\hat{S} := \hat{S} \cup \{(x^*, y)\}$, где $(x^*, y) \in E$, и значение $M_{\hat{S}}(x^*)$ минимально среди $\{M_{\hat{S}}(x) \mid (x, y) \in E\}$.

2.9 Вероятностные модели обучения

2.9.1 Дискретная вероятностная модель обучения

В **дискретной вероятностной модели обучения (ДВМО)** предполагается, что множество X является конечным или счетным, на множестве $X \times Y$ задано **вероятностное распределение** (обычно называемое просто **распределением**), т.е. функция p вида

$$p : X \times Y \to [0, 1], \tag{2.102}$$

удовлетворяющая условию $\sum\limits_{(x,y)\in X\times Y} p(x, y) = 1$.

Будем предполагать, что $\forall\, y \in Y\ \exists\, x \in X : p(x, y) > 0$.

$\forall\, (x, y) \in X \times Y$ значение $p(x, y)$ называется **вероятностью** появления пары (x, y) в обучающей выборке S.

Мы предполагаем, что все пары в S появляются независимо друг от друга.

Если выборка S большая, то число $p(x, y)$ можно понимать как приблизительную

- долю тех пар в S, которые равны (x, y), или

- частоту появления пары (x, y) в S.

$\forall\, X' \subseteq X, \forall\, y \in Y$ будем обозначать записью $p(X', y)$ значение

$$p(X', y) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{x \in X'} p(x, y). \tag{2.103}$$

Это значение можно понимать как приблизительную частоту появления в обучающей выборке объекта из X' с ответом y.

Если $X' = X$, то значение (2.103) обозначается записью $p(y)$, и понимается как приблизительная частота появления в обучающей выборке объекта с ответом y.

Отметим, что ДВМО концептуально отличается от рассмотренных выше моделей обучения:

- в рассмотренных выше моделях обучения $\forall\, x \in X$ обучающая выборка не может содержать пар вида (x, y) и (x, y'), где $y \neq y'$, т.к. вторая компонента пары (x, y) – это истинный ответ на объект x, который определяется однозначно по x,

- а в ДВМО нет понятия истинного ответа на объект, в ней любой ответ на объект может появиться с некоторой вероятностью.

Одной из компонентов ДВМО является **функция потерь**

$$\lambda : Y \times Y \to \mathbf{R}_{\geq 0}, \tag{2.104}$$

которая сопоставляет каждой паре $(y, y') \in Y \times Y$ **потерю** $\lambda_{yy'} \geq 0$, возникающую в том случае, когда на какой-либо объект дается ответ y', в то время когда правильным ответом на этот объект был бы y.

2.9.2 Оптимальные аппроксимирующие функции

Пусть a – функция вида $a : X \to Y$.

$\forall\, y \in Y$ запись $a^{-1}(y)$ обозначает прообраз y относительно a:

$$a^{-1}(y) = \{x \in X \mid a(x) = y\}.$$

Риск, соответствующий функции $a : X \to Y$ определяется как среднее значение потери при использовании a в качестве АФ:

$$R(a) = \sum_{y, y' \in Y} \lambda_{yy'} p(a^{-1}(y'), y). \tag{2.105}$$

Если $\lambda_{yy'} = [\![y \neq y']\!]$, то $R(a)$ можно интерпретировать как вероятность ошибки при использовании a в качестве АФ.

Теорема 6.

Пусть заданы распределение (2.102) и функция потерь (2.104).

Минимальное значение риска (2.105) достигается на функции a, сопоставляющей каждому $x \in X$ такой ответ $y_x \in Y$, который минимизирует значение выражения

$$\sum_{y \in Y} \lambda_{yy_x} p(x, y).$$

Доказательство.

Согласно определению значения $p(a^{-1}(y'), y)$,

$$R(a) = \sum_{y, y' \in Y} \lambda_{yy'} \sum_{x \in a^{-1}(y')} p(x, y) = \sum_{y' \in Y} \sum_{x \in a^{-1}(y')} \sum_{y \in Y} \lambda_{yy'} p(x, y). \qquad (2.106)$$

Заметим, что сумма вида $\sum\limits_{y' \in Y} \sum\limits_{x \in a^{-1}(y')} \ldots$ – это сумма вида $\sum\limits_{x \in X} \ldots$, где выражение, изображаемое многоточием во второй сумме, получается из выражения, изображаемого многоточием в первой сумме заменой всех вхождений y' на $a(x)$. Поэтому (2.106) можно переписать в виде

$$R(a) = \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} \lambda_{y, a(x)} p(x, y),$$

откуда видно, что $R(a)$ достигает минимального значения в том и только в том случае, когда $\forall\, x \in X$ сумма $\sum\limits_{y \in Y} \lambda_{y, a(x)} p(x, y)$ достигает минимального значения, что по определению y_x возможно при $a(x) = y_x$. ■

Теорема 7.

Пусть заданы распределение (2.102) и функция потерь (2.104), причем

- $\forall\, y \in Y \;\; \lambda_{yy} = 0$, и
- $\forall\, y, y' \in Y$, если $y \neq y'$, то значение $\lambda_{yy'}$ не зависит от y' (обозначим это значение λ_y).

Минимальное значение риска (2.105) достигается на функции a, сопоставляющей каждому $x \in X$ такой ответ $y_x \in Y$, который максимизирует значение выражения $\lambda_{y_x} p(x, y_x)$, т.е.

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \lambda_y p(x, y). \qquad (2.107)$$

Доказательство.
Согласно определению риска (2.105) и условиям теоремы,

$$\begin{aligned} R(a) &= \sum_{y,y'\in Y} \lambda_{yy'} p(a^{-1}(y'), y) = \sum_{y,y'\in Y, y\neq y'} \lambda_y p(a^{-1}(y'), y) = \\ &= \sum_{y,y'\in Y} \lambda_y p(a^{-1}(y'), y) - \sum_{y\in Y} \lambda_y p(a^{-1}(y), y) = \\ &= \sum_{y\in Y} \sum_{y'\in Y} \sum_{x\in a^{-1}(y')} \lambda_y p(x, y) - \sum_{y\in Y} \sum_{x\in a^{-1}(y)} \lambda_y p(x, y). \end{aligned} \tag{2.108}$$

Нетрудно видеть, что

- сумму $\sum\limits_{y'\in Y} \sum\limits_{x\in a^{-1}(y')} \lambda_y p(x, y)$ можно заменить на $\sum\limits_{x\in X} \lambda_y p(x, y)$, и
- сумму $\sum\limits_{y\in Y} \sum\limits_{x\in a^{-1}(y)} \lambda_y p(x, y)$ можно заменить на $\sum\limits_{x\in X} \lambda_{a(x)} p(x, a(x))$,

поэтому (2.108) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} R(a) &= \sum_{y\in Y} \sum_{x\in X} \lambda_y p(x, y) - \sum_{x\in X} \lambda_{a(x)} p(x, a(x)) = \\ &= \sum_{y\in Y} \lambda_y p(y) - \sum_{x\in X} \lambda_{a(x)} p(x, a(x)), \end{aligned}$$

откуда видно, что $R(a)$ достигает минимального значения в том и только в том случае, когда $\forall\, x \in X$ выражение $\lambda_{a(x)} p(x, a(x))$ достигает максимального значения, что по определению y_x возможно при $a(x) = y_x$. ■

Отметим, что функция (2.107), совпадает с функцией

$$a(x) = \arg\max_{y\in Y} \lambda_y p(y) p(x|y), \tag{2.109}$$

где $p(x|y) = \frac{p(x,y)}{p(y)}$ – вероятность появления объекта x в обучащей выборке, при условии, что ответом на этот объект является y. Значение $p(x|y)$ можно понимать как приблизительную долю (или частоту появления) пары (x, y) в подвыборке S_y, где

$$S_y = \{(x, y_x) \in S \mid y_x = y\}. \tag{2.110}$$

В ряде случаев вместо (2.109) более удобно использовать формулу

$$a(x) = \arg\max_{y\in Y} \ln\Big(\lambda_y p(y) p(x|y)\Big), \tag{2.111}$$

которая, как нетрудно видеть, определяет ту же функцию, что и (2.109).

2.9.3 Построение АФ по обучающей выборке

Пусть задана некоторая ДВМО, причем

- распределение (2.102) неизвестно, и
- функция потерь (2.104) известна и удовлетворяет условиям теоремы 7.

Также задана некоторая обучающая выборка $S \subseteq X \times Y$, построенная в соответствии с этой ДВМО.

Требуется построить a_S вида (2.109), где вместо неизвестных истинных значений вероятностей $p(y)$ и $p(x|y)$ должны быть использованы оценки $\hat{p}(y)$ и $\hat{p}(x|y)$ этих вероятностей, вычисленные по S.

В качестве оценки $\hat{p}(y)$ можно взять, например, $\frac{|S_y|}{|S|}$.

Для вычисления оценки $\hat{p}(x|y)$ обозначим записью $x_1, \ldots, x_m$ последовательность первых компонентов пар, входящих в S_y, и полагаем

$$\hat{p}(x|y) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} [\![x_i = x]\!].$$

2.9.4 Непрерывная вероятностная модель обучения

Во многих задачах машинного обучения множеством объектов X является $\mathbf{R}$ или $\mathbf{R}^n$. Для данного случая можно определить аналог рассмотренного выше понятия ДВМО, который называется **непрерывной вероятностной моделью обучения (НВМО)**. В НВМО вместо понятия вероятностного распределения используется понятие **плотности вероятности** (обычно называемой просто **плотностью**), которая представляет собой функцию p вида

$$p : X \times Y \to [0, 1],$$

имеющую излагаемый ниже смысл. Для каждой пары $(x, y) \in X \times Y$ значение p на паре (x, y) будем обозначать записью $p(x|y)$.

Предполагается, что

- на множестве X задана мера Лебега μ,
- $\forall\, y \in Y$ функция вида $X \to \mathbf{R}_{\geq 0}$, отображающая каждый $x \in X$ в $p(x|y)$, предполагается интегрируемой по Лебегу, и

$$\int_X p(x|y) d\mu = 1. \tag{2.112}$$

Для каждого измеримого подмножества $X' \subseteq X$ и каждого $y \in Y$ интеграл $\int_{X'} p(x|y)d\mu$ интерпретируется как вероятность появления в обучающей выборке S пары с первой компонентой из множества X', при условии, что вторая компонента этой пары равна y. Так же, как и в ДВМО, мы предполагаем, что все пары в S появляются независимо друг от друга. Если выборка S большая, то число $\int_{X'} p(x|y)d\mu$ можно понимать как приблизительную

- долю тех пар (x, y) в S_y (см. (2.110)), у которых $x \in X'$, или
- частоту появления в S_y пар с первой компонентой из X'.

Множество Y ответов предполагается конечным или счетным.

Одной из компонентов НВМО является распределение (обозначаемое тем же символом p) на Y. $\forall\, y \in Y$ число $p(y)$ имеет тот же смысл, что и в ДВМО.

Как и выше, в НВМО можно

- определить понятие риска, соответствующего функции $a : X \to Y$,
- и доказать, что если функция потерь (2.104) известна и удовлетворяет условиям теоремы 7, то оптимальная АФ имеет вид (2.109), где $p(x|y)$ понимается как плотность в точке x.

Таким образом, если

- задана некоторая НВМО, причем
  - плотность $p(x|y)$ либо неизвестна, либо известна лишь частично (например, известно, что она имеет вид $\varphi(x, \theta)$, где функция φ известна, а θ – неизвестный параметр), и
  - функция потерь (2.104) известна и удовлетворяет условиям теоремы 7,
- и задана некоторая обучающая выборка $S \subseteq X \times Y$, построенная в соответствии с этой НВМО,

то оптимальную АФ a_S можно искать в виде (2.109), где вместо неизвестных истинных значений вероятностей $p(y)$ и $p(x|y)$ используются оценки $\hat{p}(y)$ и $\hat{p}(x|y)$ этих вероятностей, вычисленные по S,

Как и выше, в качестве оценки $\hat{p}(y)$ можно взять $\frac{|S_y|}{|S|}$.

Ниже излагаются различные варианты вычисления оценки $\hat{p}(x|y)$, в зависимости от вида множества объектов X и предположений о классе функций, в котором содержится функция $p(x|y) : X \to [0, 1]$.

Обозначим записью X_{S_y} множество первых компонентов пар, входящих в S_y. Элементы X_{S_y} будем обозначать записями x_1, …, x_m.

Рассмотрим различные виды, которые может иметь множество X.

1. $X = \mathbf{R}$.

   - Согласно определению плотности, при небольшом числе $h > 0$ произведение $p(x) \cdot 2h$ приблизительно равно количеству точек из X_{S_y}, попавших в отрезок $[x - h, x + h]$.
     Поэтому $\hat{p}(x|y)$ можно определить как долю точек из X_{S_y}, лежащих внутри отрезка $[x - h, x + h]$:

     $$\hat{p}(x|y) = \frac{1}{2mh} \sum_{i=1}^{m} [\![|x - x_i| < h]\!]. \tag{2.113}$$

   - Другой вид оценки $p(x|y)$ – оценка Парзена-Розенблатта:

     $$\hat{p}(x|y) = \frac{1}{mh} \sum_{i=1}^{m} K\Big(\frac{x - x_i}{h}\Big) \tag{2.114}$$

     где $K(z)$ – четная функция, называемая **ядром**, такая, что

     $$\int_{-\infty}^{+\infty} K(z)\, dz = 1,$$

     и h – параметр, называемый **шириной окна**, небольшое положительное число.

   АФ, построенную в соответствии с приведенным выше определением, будем обозначать записью a_S^h, явно указывая ширину окна h. Оптимальным является такое h, которое минимизирует риск

   $$\sum_{(x,y_x) \in S} [\![a^h_{S \setminus \{(x,y_x)\}}(x) \neq y_x]\!]. \tag{2.115}$$

2. X – метрическое пространство, т.е. на X задана метрика ρ.

   В этом случае м.б. использована следующая оценка $\hat{p}(x|y)$:

   $$\hat{p}(x|y) = \frac{1}{mV(h)} \sum_{i=1}^{m} K\Big(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\Big) \tag{2.116}$$

   где K, h – параметры, имеющие тот же смысл, что и аналогичные параметры выше (ядро и ширина окна, соответственно), и $V(h)$ –

нормирующий множитель, предназначенный для того, чтобы (2.116) было плотностью, т.е. удовлетворяло условию (2.112).

Если распределение объектов в пространстве X сильно неравномерно, то лучше использовать переменную ширину окна, определяемую в каждой точке $x \in X$ как расстояние от x до $(k+1)$-го соседа, где оптимальное значение k м.б. найдено из условия, аналогичного условию (2.115).

3. $X = \mathbf{R}^n$.

   - Если нет никаких предположений о том, какой вид может иметь плотность $p(x|y)$, то можно использовать оценку

$$\hat{p}(x|y) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\prod_{j=1}^{n}\frac{1}{h_j}K\Big(\frac{x_{0j}-x_{ij}}{h_j}\Big),$$

     где

     – $\forall\, i = 1,\ldots,m \quad x_i = (x_{i1},\ldots,x_{in}), x = (x_{01},\ldots,x_{0n})$, и
     – $K, h_1, \ldots, h_n$ – параметры, имеющие тот же смысл, что и аналогичные параметры в предыдущем пункте (т.е. K – ядро, и $h_1,\ldots,h_n$ – ширины окон, соответствующих каждому из признаков).

   - Если известно, что $p(x|y)$ имеет гауссов вид

$$\begin{array}{l}\mathcal{N}(x;\mu,\Sigma) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}}|\Sigma|^{-\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{2}(x-\mu)^\top\Sigma^{-1}(x-\mu)}\\ (\top \text{ обозначает транспонирование}),\end{array} \tag{2.117}$$

     где μ и Σ – неизвестные параметры:

     – $\mu \in \mathbf{R}^n$,
     – Σ – симметричная, невырожденная, положительно определенная матрица порядка n, называемая **ковариационной матрицей**,

     то нахождение оценки $\hat{p}(x|y)$ сводится к нахождению оценок $\hat{\mu}$ и $\hat{\Sigma}$, которые м.б. вычислены по правилам

$$\hat{\mu} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}x_i; \quad \hat{\Sigma} = \frac{1}{m-1}\sum_{i=1}^{m}(x_i-\hat{\mu})(x_i-\hat{\mu})^\top.$$

     Некоторое обоснование данных правил заключается в том, что

– μ совпадает с мат. ожиданием Ex случайной величины x с плотностью (2.117), т.е. с интегралом $\int_{\mathbf{R}^n} x\mathcal{N}(x;\mu,\Sigma)dx$,
– Σ совпадает с мат. ожиданием $E(x-\mu)(x-\mu)^\top$.

- Если $\forall\, y \in Y \;\; p(x|y)$ имеет вид (2.117), и известно, что ковариационные матрицы в (2.117) одинаковы для всех $y \in Y$, то оценка $\hat{\Sigma}$ этих матриц м.б. вычислена по формуле

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{|S|-|Y|}\sum_{(x,y_x)\in S}(x-\hat{\mu}_{y_x})(x-\hat{\mu}_{y_x})^\top.$$

В данном случае АФ, вычисленную по формуле (2.111), можно записать (опуская сложение с константой в $\arg\max\limits_{y\in Y}(\ldots)$) в виде

$$\begin{aligned} a(x) &= \arg\max_{y\in Y}\Big(\ln(\lambda_y p(y)) - \tfrac{1}{2}(x-\hat{\mu}_y)^\top\hat{\Sigma}^{-1}(x-\hat{\mu}_y)\Big) = \\ &= \arg\max_{y\in Y}\Big(\ln(\lambda_y p(y)) - \tfrac{1}{2}\hat{\mu}_y^\top\hat{\Sigma}^{-1}\hat{\mu}_y + x^\top\hat{\Sigma}^{-1}\hat{\mu}_y\Big) = \\ &= \arg\max_{y\in Y}(x^\top\alpha_y + \beta_y), \end{aligned} \tag{2.118}$$

где $\alpha_y = \hat{\Sigma}^{-1}\hat{\mu}_y$, $\beta_y = \ln(\lambda_y p(y)) - \frac{1}{2}\hat{\mu}_y^\top\hat{\Sigma}^{-1}\hat{\mu}_y$.

АФ (2.118) называется **линейным дискриминантом Фишера**.

После вычисления оценки $\hat{p}(x|y)$

- те объекты из S_y, для которых значение $\hat{p}(x|y)$ мало, рассматриваются как выбросы,
- соответствующие пары (x, y_x) удаляются из S,
- после чего оценка $\hat{p}(x|y)$ перевычисляется.

2.9.5 EM-алгоритм

EM-алгоритм предназначен для вычисления оценки $\hat{p}(x|y)$, в предположении, что плотность $p(x|y)$ является **смесью** плотностей вида $\varphi(x,\theta_j)$, где $j = 1,\ldots,k$, и функция φ предполагается известной, т.е.

$$p(x|y) = \sum_{j=1}^{k} w_j\varphi(x,\theta_j), \tag{2.119}$$

где $w_1, \ldots, w_k, \theta_1, \ldots, \theta_k$ – неизвестные параметры, причем

$$\forall\, j = 1, \ldots, k \;\; w_j \in \mathbf{R}_{\geq 0}, \quad \sum_{j=1}^{k} w_j = 1. \tag{2.120}$$

Обозначим символом Θ вектор параметров, входящих в (2.119), т.е.

$$\Theta = (w_1, \ldots, w_k, \theta_1, \ldots, \theta_k).$$

Нахождение оценки $\hat{p}(x|y)$ сводится к нахождению вектора $\hat{\Theta}$ оценок всех параметров, входящих в Θ.

Для решения данной задачи раздельно рассматриваются случаи, когда число k компонентов смеси известно, и когда это число неизвестно.

Число k компонентов смеси известно

В данном случае строится последовательность $\hat{\Theta}^{(1)}, \hat{\Theta}^{(2)}, \ldots$ приближений к искомому вектору оценок параметров $\hat{\Theta}$. Алгоритм

- использует матрицу $G = (g_{ij})_{m \times k}$ скрытых (hidden) переменных, и
- заключается в итерационном повторении двух шагов:
  - **E-шаг**: вычисление G по текущему приближению $\hat{\Theta}^{(s)}$,
  - **M-шаг**: вычисление следующего приближения $\hat{\Theta}^{(s+1)}$ по текущим матрице G и вектору $\hat{\Theta}^{(s)}$.

Одним из входных данных алгоритма является небольшое положительное число δ, используемое в критерии остановки.

Первое приближение $\hat{\Theta}^{(1)}$ выбирается произвольно (или исходя из каких-либо соображений), с условием (2.120).

s–я итерация (где $s \geq 1$) имеет вид:

E-шаг (expectation) :

$\forall\, i = 1, \ldots, m,\ \forall\, j = 1, \ldots, k \quad g_{ij} = \frac{w_j \varphi(x_i, \theta_j)}{p(x_i)}$, где

- w_j и θ_j – компоненты текущего приближения $\hat{\Theta}^{(s)}$,
- $p(x_i) = \sum\limits_{j=1}^{k} w_j \varphi(x_i, \theta_j)$.

Если $s \geq 2$, и $\max\limits_{i,j} |g_{ij} - g'_{ij}| < \delta$, где g'_{ij} – соответствующая компонента матрицы G, вычисленной на предыдущей итерации, то алгоритм заканчивает свою работу, его результатом является $\hat{\Theta}^{(s)}$.

M-шаг (maximization) :

Целью данного шага является решение оптимизационной задачи

$$\prod_{i=1}^{m} p(x_i) \to \max_{\Theta},$$

(где $p(x_i) = \sum\limits_{j=1}^{k} w_j \varphi(x_i, \theta_j)$) при ограничении $\sum\limits_{j=1}^{k} w_j = 1$ (данная задача называется **задачей максимизации правдоподобия**), которая эквивалентна оптимизационной задаче

$$\ln \prod_{i=1}^{m} p(x_i) = \sum_{i=1}^{m} \ln p(x_i) \to \max_{\Theta}$$

при указанном выше ограничении.

Функция Лагранжа этой оптимизационной задачи имеет вид

$$L = \sum_{i=1}^{m} \ln p(x_i) - \lambda\Big(\sum_{j=1}^{k} w_j - 1\Big).$$

Одним из необходимых условий оптимальности является соотношение

$$\frac{\partial L}{\partial w_j} = \sum_{i=1}^{m} \frac{\varphi(x_i, \theta_j)}{p(x_i)} - \lambda = 0, \quad \forall\, j = 1, \ldots, k. \tag{2.121}$$

Из (2.121) следуют равенства

$$w_j \sum_{i=1}^{m} \frac{\varphi(x_i, \theta_j)}{p(x_i)} = w_j \lambda \quad (\forall\, j = 1, \ldots, k), \tag{2.122}$$

просуммировав которые по j, получаем равенство

$$\sum_{j=1}^{k} w_j \sum_{i=1}^{m} \frac{\varphi(x_i, \theta_j)}{p(x_i)} = \sum_{j=1}^{k} w_j \lambda,$$

из которого следует равенство

$$\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{k} w_j \frac{\varphi(x_i, \theta_j)}{p(x_i)} = \lambda \sum_{j=1}^{k} w_j = \lambda. \tag{2.123}$$

Левая часть (2.123) равна сумме m единиц, т.е. m, поэтому $\lambda = m$. Подставляя в (2.122) $\lambda = m$, и вспоминая определение g_{ij}, получаем равенства $\sum\limits_{i=1}^{m} g_{ij} = w_j m \quad (\forall\, j = 1, \ldots, k)$, т.е.

$$w_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} g_{ij}, \quad \forall\, j = 1, \ldots, k. \tag{2.124}$$

Неравенства $w_j \geq 0$ будут выполнены на каждой итерации, т.к. они выполнены для $\hat{\Theta}^{(1)}$.

Другие необходимые условия оптимальности имеют вид

$$\begin{aligned}
&\tfrac{\partial L}{\partial \theta_j} = \sum_{i=1}^{m} \tfrac{w_j}{p(x_i)} \tfrac{\partial}{\partial \theta_j} \varphi(x_i, \theta_j) = \\
&= \sum_{i=1}^{m} \tfrac{w_j \varphi(x_i, \theta_j)}{p(x_i)} \tfrac{\partial}{\partial \theta_j} \ln \varphi(x_i, \theta_j) = \\
&= \sum_{i=1}^{m} g_{ij} \tfrac{\partial}{\partial \theta_j} \ln \varphi(x_i, \theta_j) = \\
&= \tfrac{\partial}{\partial \theta_j} \sum_{i=1}^{m} g_{ij} \ln \varphi(x_i, \theta_j) = 0 \quad (\forall\, j = 1, \ldots, k).
\end{aligned} \tag{2.125}$$

Последнее равенство в (2.125) эквивалентно соотношению

$$\theta_j = \arg\max_{\theta} \sum_{i=1}^{m} g_{ij} \ln \varphi(x_i, \theta) \quad (\forall\, j = 1, \ldots, k). \tag{2.126}$$

Соотношения (2.124) и (2.126) являются теми правилами, в соответствии с которыми вычисляются соответствующие компоненты вектора $\hat{\Theta}^{(s+1)}$.

Если $\varphi(x, \theta_j)$ имеет гауссов вид, т.е. $\varphi(x, \theta_j) = \mathcal{N}(x, \mu_j, \Sigma_j)$, то значение параметра $\theta_j = (\mu_j, \Sigma_j)$, удовлетворяющее условию (2.126), можно выразить в явном виде:

$$\mu_j = \tfrac{1}{m w_j} \sum_{i=1}^{m} g_{ij} x_i, \quad \Sigma_j = \tfrac{1}{m w_j} \sum_{i=1}^{m} g_{ij} (x_i - \mu_j)(x_i - \mu_j)^\top.$$

Число компонентов смеси неизвестно

В данном случае компоненты смеси строятся в процессе обучения.

Параметры алгоритма:

- R – максимально допустимый разброс значений $p(x_i)$,

- m_0 – минимальная длина выборки, по которой можно восстановить плотность,
- δ – параметр критерия остановки.

Сначала строится первая компонента: $k := 1$, $w_1 := 1$, и

$$\theta_1 := \arg\max_{\theta} \sum_{i=1}^{m} \ln \varphi(x_i, \theta).$$

Затем выполняется цикл по k (начиная с $k = 2$), тело этого цикла состоит из следующих действий:

1. Строится множество $U := \{x_i \in S_y : p(x_i) < \frac{1}{R} \max_j p(x_j)\}$,
   (U = объекты, не подходящие ни к одной из компонентов).
2. **Если** $|U| < m_0$, **то** работа алгоритма завершается.
   (В данном случае объекты из U рассматриваются как выбросы.)
3. **Иначе** добавляется новая (k-я) компонента с параметрами
$$w_k := \tfrac{1}{m}|U|, \quad \theta_k := \arg\max_{\theta} \sum_{x_i \in U} \ln \varphi(x_i, \theta),$$
$$\forall\, j = 1, \ldots, k-1 \quad w_j := w_j(1 - w_k).$$
4. Для уточнения построенного в предыдущем действии вектора параметров Θ запускается EM-алгоритм на S_y с k компонентами смеси и параметром остановки δ.

Литература

[1] Вьюгин В.В. Математические основы машинного обучения и прогнозирования. Москва, издательство МЦНМО, 2018. 384 с.

[2] Ветров Д.П., Кропотов Д.А. Алгоритмы выбора моделей и построения коллективных решений в задачах классификации, основанные на принципе устойчивости. Москва, URSS, 2006. 112 с.

[3] Информационно-аналитический ресурс по машинному обучению `http://www.machinelearning.ru/`

[4] Воронцов К. В., Математические методы обучения по прецедентам (теория обучения машин).
`http://www.machinelearning.ru/wiki/images/6/6d/Voron-ML-1.pdf`

[5] F. Rosenblatt. The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain. Psychological Review, 65(6):386. (1958)

[6] A. Novikoff. On convergence proofs on perceptrons. In Proceedings of the Symposium on the Mathematical Theory of Automata, volume 12, pages 615–622. (1962)

[7] M. Mohri and A. Rostamizadeh. Perceptron Mistake Bounds. (2013)
`https://arxiv.org/pdf/1305.0208.pdf`

[8] В. Н. Вапник, А. Я. Червоненкис. Теория распознавания образов. Статистические проблемы обучения. М., Наука. (1974)

[9] Айзерман М. А., Браверман Э. М., Розоноэр Л. И. Метод потенциальных функций в теории обучения машин. - М.: Наука, 1970. - 320 с.

[10] Головко В. А. Нейронные сети: обучение, организация и применение. - М.: ИПР- ЖР, 2001.

[11] Загоруйко Н. Г. Прикладные методы анализа данных и знаний. - Новосибирск: ИМ СО РАН, 1999.

[12] Лапко А. В., Ченцов С. В., Крохов С. И., Фельдман Л. А. Обучающиеся системы обработки информации и принятия решений. Непараметрический подход. - Новосибирск: Наука, 1996.

[13] Нейроинформатика / А. Н. Горбань, В. Л. Дунин-Барковский, А. Н. Кирдин, Е. М. Миркес, А. Ю. Новоходько, Д. А. Россиев, С. А. Терехов и др. - Новосибирск: Наука, 1998. - 296 с.

[14] Хардле В. Прикладная непараметрическая регрессия. - М.: Мир, 1993.

[15] Bishop C. M. Pattern Recognition and Machine Learning. - Springer, Series: Information Science and Statistics, 2006. - 740 pp.

[16] Burges C. J. C. A tutorial on support vector machines for pattern recognition // Data Mining and Knowledge Discovery. - 1998. - Vol. 2, no. 2. - Pp. 121–167.
http://citeseer.ist.psu.edu/burges98tutorial.html

[17] Murphy Kevin P. Machine Learning: A Probabilistic Perspective. The MIT Press, 2012, 1104 с.

[18] Хайкин С. Нейронные сети. Полный курс. Вильямс, 2018, 1104 с.

[19] Николенко С., Кадурин А., Архангельская Е. Глубокое обучение. Погружение в мир нейронных сетей, Питер, 2018. 480 с.

[20] Гудфеллоу Я., Бенджио И., Курвилль А. Глубокое обучение. ДМК Пресс, 2017, 652 с.

[21] Лесковец Ю., Раджараман А., Ульман Д. Анализ больших наборов данных. ДМК Пресс, 2016, 498 с.

[22] Kung S.Y. Kernel Methods and Machine Learning, Cambridge University Press, 2014, 578 с.

[23] Skansi S. Introduction to Deep Learning: From Logical Calculus to Artificial Intelligence. Springer, 2018. 191 с.

[24] Smith J. Machine Learning Systems. Manning Publications Co., 2018. 253 с.

[25] Мюллер А., Гвидо С. Введение в машинное обучение с помощью Python, Москва, 2017. 393 с.

[26] Флах П. Машинное обучение. Наука и искусство построения алгоритмов, которые извлекают знания из данных. ДМК Пресс, 2015. 402 с.

[27] Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. The Elements of Statistical Learning. Springer, 2014. 739 p.

[28] Мерков А. Б. Распознавание образов. Введение в методы статистического обучения. 2011. 256 с.

[29] Мерков А. Б. Распознавание образов. Построение и обучение вероятностных моделей. 2014. 238 с.

[30] Коэльо Л.П., Ричарт В. Построение систем машинного обучения на языке Python. 2016. 302 с.

[31] Barber D. Bayesian Reasoning and Machine Learning. Cambridge University Press, 2012.

[32] Mackay D.J.C. Information Theory, Inference, and Learning Algorithms. Cambridge University Press, 2003.

[33] Wainwright M.J., Jordan M.I. Graphical Models, Exponential Families, and Variational Inference. Foundations and Trends in Machine Learning, NOWPress, 2008.

[34] Koller D., Friedman N. Probabilistic Graphical Models: Principles and Techniques. The MIT Press, 2009.