УДК 004

РАНДОМИЗИРОВАННОЕ МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ ПРИ ОГРАНИЧЕННОМ ОБЪЕМЕ ДАННЫХ

Ю.С. Попков
Институт системного анализа ФИЦ ИУ РАН,
Институт проблем управления РАН
Россия, Москва
E-mail: popkov@isa.ru

Ключевые слова: рандомизация, жесткие и мягкие процедуры рандомизации, неопределенность, энтропия, матричные нормы, эмпирические балансы, классификация текстов.

Аннотация: Предлагаются «жесткая» и «мягкая» рандомизация для процедур машинного обучения, которые основаны на точном и приближенном выполнении эмпирических балансов. Приводится пример бинарной вероятностной классификации.

1. Введение

Процедуры и алгоритмы машинного обучения (*МО*) являются ключевыми в современных концепциях извлечения знаний. Существующие представления о *МО* базируются на параметризованных с детерминированным происхождением моделях [1, 2], параметры которых не известны, но, используя данные, можно найти оценки их значений.

Мы развиваем иной, а именно, рандомизированный подход к проблемам машинного обучения (*РМО*), особенность которого состоит в том, что в его рамках параметризованная модель имеет случайные параметры, а данные используются для оценивания не их значений, а функций плотности распределения вероятностей параметров. Процедуры *РМО* формируют энтропийно-оптимальные оценки функций плотности распределения вероятностей параметров и шумов. Обученная модель генерирует ансамбли случайных векторов (случайных траекторий), соответствующих найденным оптимальным функциям *ПРВ* параметров и шумов. Приводятся примеры решения задач вероятностной классификации и рандомизированного прогнозирования с использование моделей динамического регрессии.

2. *РМО*-алгоритмы для «жесткой» и «мягкой» рандомизации

Рандомизация представляется альтернативным подходом к существующему пониманию машинного обучения. Он направлен на повышение достоверности, надежности и гибкости *МО*-процедур в условиях неопределенности и функционировании при ограниченных объемах данных, часть из которых считается входными X, а другая - выходными Y. Основными элементами *РМО* являются рандомизированная параметризованная модель (*РПМ*) и алгоритм рандомизированного машинного обучения (*РМО-А*). *РПМ* преобразует входные данные X в модельный выход Z. Если на этапе обучения производится точная балансировка модельного и обучающего выходов, то имеет место «жесткая» рандомизация, если - приближенная, то имеет место «мягкая» рандомизация [3]. В общем случае связь между входными и выходными данными в обучающей коллекции предполагается динамической. Это означает, что модельный выход, наблюдаемый в момент времени j, $j = \overline{1,s}$ зависит от входа, наблюдаемого на некотором историческом интервале $j-\varrho, \dots, j$, который описывается матрицей $X_\varrho(j) = [\mathbf{x}^{(j-\varrho)}, \dots, \mathbf{x}^{(j)}]$. Математическим образом этой связи является векторный функционал $\hat{\Omega}(X_\varrho(j)\,|\,\mathbf{a})$, т.е. вектор модельного выхода в j-ый момент времени

$$\mathbf{z}^{(j)} = \hat{\Omega}(X_\varrho(j)\,|\,\mathbf{a}), \tag{1}$$

где случайные параметры интервального типа $\mathbf{a} \in \mathcal{A} = [\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+]$, и их вероятностные свойства характеризуются непрерывно-дифференцируемой функцией плотности распределения вероятностей (*ПРВ*) $P(\mathbf{a})$. Модельный выход наблюдается с ошибками, также интервального типа $\bar{\xi}^{(j)} \in \Xi_j = [\bar{\xi}^{(j)}_-, \bar{\xi}^{(j)}_+]$, $j = \overline{1,s}$ с *ПРВ* $Q_j(\bar{\xi}^{(j)})$, где s - количество наблюдений в обучающей коллекции.

РМО-А для «жесткой» рандомизации формулируется в терминах следующей задачи функционального энтропийно-линейного программирования ляпуновского типа [4]:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}[P(\mathbf{a}), Q(\bar{\xi})] &= -\int_{\mathcal{A}} P(\mathbf{a}) \ln P(\mathbf{a})\, d\mathbf{a} - \\ &- \sum_{j=1}^{s} \int_{\Xi_j} Q_j(\bar{\xi}^{(j)}) \ln Q_j(\bar{\xi}^{(j)})\, d\bar{\xi}^{(j)} \Rightarrow \max,\end{aligned} \tag{2}$$

при выполнении условий нормировки функций *ПРВ*

$$\int_{\mathcal{A}} P(\mathbf{a}) d\mathbf{a} = 1, \qquad \int_{\Xi_j} Q_j(\bar{\xi}^{(j)}) d\bar{\xi}^{(j)} = 1, \quad j = \overline{1,s}; \tag{3}$$

и эмпирических балансов средних

$$\int_{\mathcal{A}} P(\mathbf{a}) \hat{\Omega}(X_\varrho(j)\,|\,\mathbf{a}) d\mathbf{a} + \int_{\Xi_j} Q_j(\bar{\xi}^{(j)}) d\bar{\xi}^{(j)} d\bar{\xi}^{(j)} = \mathbf{y}(j), \qquad j = \overline{1,s}. \tag{4}$$

Для задач этого типа условия оптимальности могут быть получены с использованием функционала Лагранжа и производных Гато [4]. Отсюда следуют выражения для энтропийно-оптимальных функций *ПРВ* параметров *РПМ* и шумов измерений:

$$
\begin{aligned}
P^*(\mathbf{a}) &= \frac{\exp\left[-\sum_{j=1}^s \langle \bar\theta^{(j)}, \hat{\mathbf{z}}^{(j)}\rangle\right]}{\mathcal{P}(\bar\theta)}, \\
Q_j^*(\bar\xi^{(j)}) &= \frac{\exp\left[-\langle \bar\theta^{(j)}, \bar\xi^{(j)}\rangle\right]}{\mathcal{Q}_j(\bar\theta^{(j)})}, \qquad (5)\\
& j = \overline{1,s}.
\end{aligned}
$$

В этих равенствах

$$
\begin{aligned}
\mathcal{P}(\bar\theta) &= \int_{\mathcal{A}} \exp\left[-\sum_{j=1}^s \langle \bar\theta^{(j)}, \hat{\mathbf{z}}^{(j)}\rangle\right] d\mathbf{a}, \\
\mathcal{Q}_j(\bar\theta^{(j)}) &= \int_{\Xi_j} \exp\left[-\langle \bar\theta^{(j)}, \bar\xi^{(j)}\rangle\right] d\bar\xi^{(j)}, \quad j = \overline{1,s}. \qquad (6)
\end{aligned}
$$

(7)

Здесь $\bar\theta = \{\bar\theta^{(1)}, \dots, \bar\theta^{(s)}\}$ - множители Лагранжа. Из (5, 6) следует, что энтропийно-оптимальные функции *ПРВ* принадлежат экспоненциальному семейству, параметризованному множителями Лагранжа. Значения указанных множителей Лагранжа определяются следующими уравнениями, возникающими из эмпирических балансов (4) при подстановке в них функций *ПРВ* из (5, 6):

$$
\mathcal{P}^{-1}(\bar\theta)\Phi_j(\bar\theta) + \mathcal{Q}_j^{-1}(\bar\theta)\Psi_j(\bar\theta) = \mathbf{y}^{(j)}, \quad j = \overline{1,s}, \qquad (8)
$$

где

$$
\begin{aligned}
\Phi_j(\bar\theta) &= \int_{\mathcal{A}} \hat{\mathbf{z}}^{(j)} \exp\left[-\sum_{j=1}^s \langle \bar\theta^{(j)}, \hat{\mathbf{z}}^{(j)}\rangle\right] d\mathbf{a}, \\
\Psi_j(\bar\theta) &= \int_{\Xi_j} \bar\xi^{(j)} \exp\left[-\langle \bar\theta^{(j)}, \bar\xi^{(j)}\rangle\right] d\bar\xi^{(j)}. \qquad (9)
\end{aligned}
$$

Уравнения (8) образуют особый класс нелинейных уравнений, в которые входят функции $\Phi_j(\bar\theta), \Psi_j(\bar\theta)$ от множителей Лагранжа $\bar\theta$, определяемые многомерными интегралами на параллелепипедах - доменах параметров модели и измерительных шумов.

В *РМО-А* для «мягкой» рандомизации эмпирические балансы выполняются приближенно в рамках условной минимизации синтетического функционала:

(10)

$$
J[P(\mathbf{a}), Q(\bar\xi)] = \mathcal{H}[P(\mathbf{a}), Q(\bar\xi)] - \sum_{j=1}^s \int_{\mathcal{A}} P(\mathbf{a})\mathcal{N}_{z,y}^{(j)}(\mathbf{a})d\mathbf{a} - \sum_{j=1}^s \int_{\Xi_j} Q_j(\bar\xi^{(j)}\mathcal{N}_{\xi}^{(j)}(\bar\xi^{(j)}) \Rightarrow \max,
$$

при условиях нормировки *ПРВ*

$$
\int_{\mathcal{A}} P(\mathbf{a})d\mathbf{a} = 1, \qquad \int_{\Xi_j} Q_j(\bar\xi^{(j)})d\bar\xi^{(j)} = 1, j = \overline{1,s}. \qquad (11)
$$

Здесь качество выполнения эмпирических балансов характеризуется нормой $\mathcal{N}_{z,y}^{(j)}(\mathbf{a}) = \|\mathbf{z}(j \mid \mathbf{a}) - \mathbf{y}^{(j)}\|_H$, а мощность шумов - нормой $\mathcal{N}_{\xi}^{(j)}(\bar\xi^{(j)}) = \|\bar\xi^{(j)}\|_H$. Эта задача также ляпуновского типа, и ее решение может быть найдено с помощью условий оптимальности в терминах производных Гато [4]. Будем иметь

$$P^*(\mathbf{a}) = \frac{\exp\left[-\sum_{j=1}^{s}\left(\mathcal{N}_{z,y}^{(j)}(\mathbf{a}) + \mathcal{N}_{\xi}^{(j)}(\bar{\xi}^{(j)})\right)\right]}{\mathcal{P}},$$

$$Q_j^*(\bar{\xi}^{(j)}) = \frac{\exp\left[-\mathcal{N}_{\xi}^{(j)}(\bar{\xi}^{(j)})\right]}{\mathcal{Q}_j}, \quad j = \overline{1,s}. \tag{12}$$

где

$$\mathcal{P} = \int_{\mathcal{A}} P^*(\mathbf{a})d\mathbf{a},$$

$$\mathcal{Q}_j = \int_{\Xi_j} Q_j^*(\bar{\xi}^{(j)})d\bar{\xi}^{(j)}, \quad j = \overline{1,s}. \tag{13}$$

Отсюда видно, что при «мягкой» рандомизации требуются вычислительные ресурсы только на вычисление многомерных интегралов (13).

3. Пример: РМО-А с «жесткой» рандомизацией для бинарной вероятностной классификации

Рассмотрим рандомизированный линейный классификатор, в котором используется однослойная нейронная сеть с четырьмя случайными параметрами. Результаты ее обучения, т.е. дву-мерное сечение энтропийно-оптимальной *ПРВ*, показано на на рис. 1. На рис. 2a–2b показаны эмпирические вероятности принадлежности документа классу 1 и 2.

Список литературы

1. Bishop C.M. Pattern Recognition and Machine Learning. Springer, Series: Information Theory and Statistics, 2006.
2. Воронцов К.В. Математические методы обучения по прецендентам. Курс лекций МФТИ, 2006.
3. Popkov Yu.S. Soft Randomized Mashine Learning. Doklady Mathematics. 2018. Vol. 98, No. 3. P. 646-647.
4. Kaashoek M.A., Seatzu S., van der Mee C. Recent Advances in Operator Theory and its Applications. Springer, 2006. 478 p.

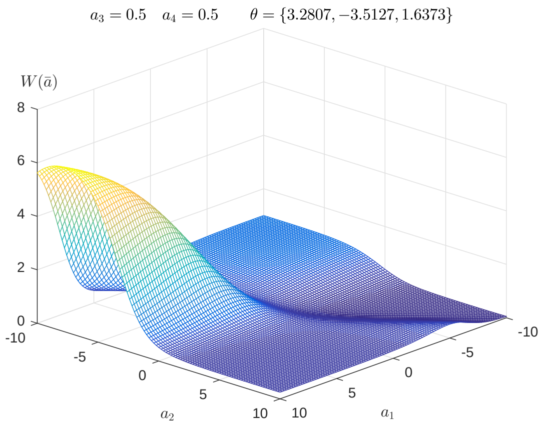
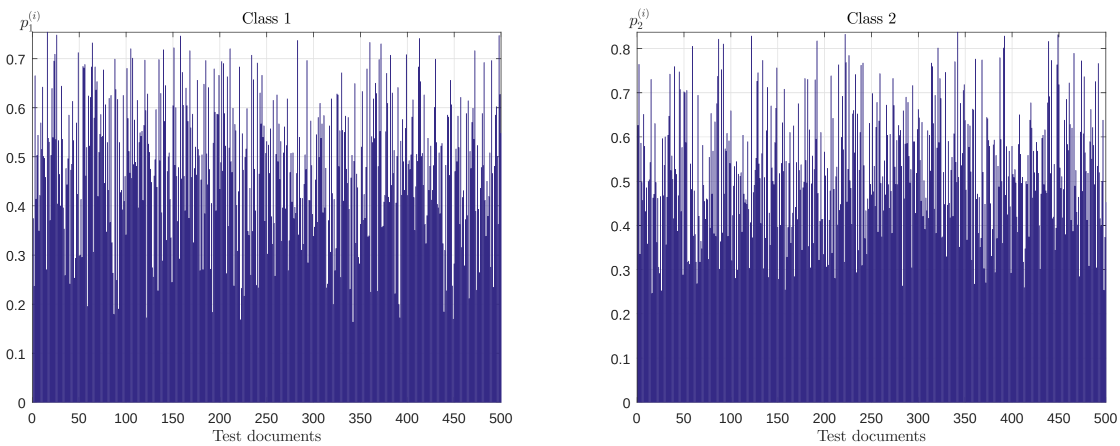


Рис. 1: Двумерное сечение функции ПРВ для $a_3 = 0{,}5$, $a_4 = 0{,}5$.



(a) (b)

Рис. 2: Эмпирические вероятности принадлежности классам.