



Санкт-Петербургский
Государственный
Политехнический
Университет

Институт компьютерных
наук и технологий

курс: Решение прикладных задач методами машинного обучения

Лекция 5

Методы решения прикладных задач МО:
возможности формализации и варианты
решения

12 октября 2022 г.

Что было на прошлой лекции:

Были рассмотрены:

- Подходы к решению прикладных задач с использованием методов МО на примере **медицинской тематики и управления загрузкой суперкомпьютеров.**
- Было установлено, что хотя **решения, доставляемые с помощью современных систем ИИ, которые прошли цикл МО, можно рассматривать как «выход» черного ящика, однако они**

должны быть **объяснимы**

в окрестности

конкретного

примера (набора входных данных) с помощью

набора терминов или

дескрипторов,

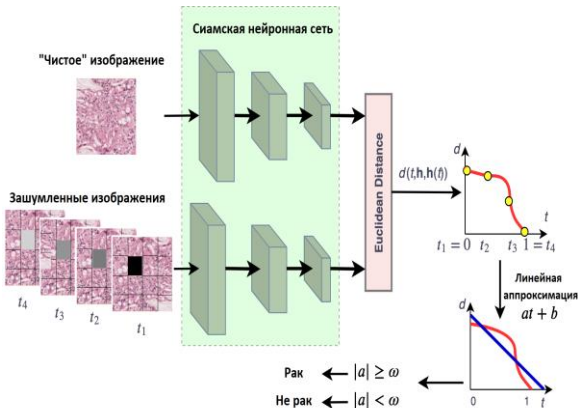
(однозначных

терминов)



Был рассмотрен метод «обучение через объяснение» и что такое «фактор внимания»

Konstantinov A., Utkin L., Multiple Instance Learning through Explanation by Using a Histopathology Example // 2022 31st Conference of Open Innovations Association



«шум» как фактор внимания



Было показано, что МО это построение вычислимой функции вывода

Система МО:

- Хранит в памяти

- описание множества «выходных» понятий, которых достаточно, чтобы построить **вычислимую** характеристическую функцию (х.ф.) вывода этих понятий из входного набора данных.

- Обладает

- ресурсами оперативной памяти для хранения поступивших на вход данных и текущих параметров («опыта» используемой х.ф.
- функцией «само-внимания» (фильтрации или сглаживания входного потока данных....)
- правилами транзитивности (трансфером знаний) между множеством входных данных и множества «выходных» понятий

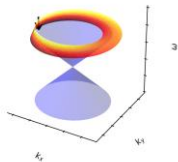
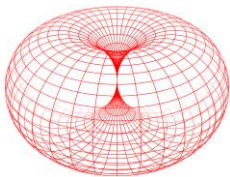
- **Тема сегодняшней лекции:** подходы к формализации задачи МО и способы описания возможных вариантов решений

Введение. Уточним задачу, ответив на вопросы

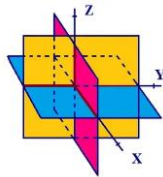
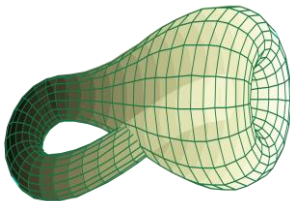
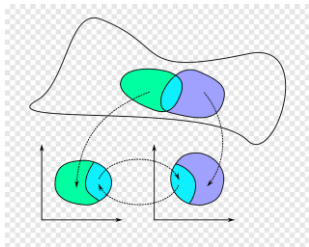
- В чем суть **задачи обучения**
- Как можно представить решение **задачи обучения**
- Является ли задача обучения **«корректной по Адамару»**

- Пояснения.
 - **Корректно поставленная задача** по Адамару в математике называется прикладная задача, решение которой существует единственно устойчиво и непрерывно зависит от входных данных (**непрерывно в некоторой разумной топологии**)
 - топология - раздел математики, изучающий в самом общем виде явление **непрерывности**.

Как выглядят различные «топологическое пространства»
в котором любой объект является объединением
элементов «базы»



В 3D векторном
пространстве
векторов
«много», а базис
пространства
состоит из трех
ортогональных
векторов



суть задачи обучения

Факт: Существует явление «обучение». Суть явления – поддержание «актуального» состояния **оператора непрерывного отображения** в общем случае счетного множества входных данных («облако данных») в **конечное множество «предметных» понятий**, характеризующих **существенные свойства** объектов реальности.

- Поддержание актуальности возможно только в т.н. **активной системе** (в физике рассматриваются лишь: замкнутые, закрытые и открытые системы)

Чтобы формализовать задачу обучения надо определить, что есть

1. «объект» **машинного обучения**
2. «предмет» **машинного обучения**

О чем же «обратная задача»

- Проблема: «физики» оптимистично верит, что законы Природы описываются «хорошими» гладкими функциями, которые можно дифференцировать и интегрировать некоторые уравнения по правилам (известным алгоритмам)
- Итак, вычислить решение уравнений, содержащих такие функции, значит надо уметь решить «прямую» задачу, используя для этого соответствующие уравнения и усвоенные ранее правила. Но сами уравнения имеют «структуру», которая] определяет переменные и параметры.
- Чтобы определить параметры уравнений, которые генерируют воспринимаемые данные, надо научиться решить т.н. «обратные» задачи.
- Термин «обратная задача» был введен выдающимся российским математиком М.М. Лаврентьевым (1932-2010). Проблема: обратные задачи «некорректны по Адамару» – имеют множество решений. Чтобы выбрать «правильное решение» задачу надо «регуляризовать» – наложить ограничения, чтобы сохранить свойство «непрерывности» решений.

Процесс обучения как решение «обратной задачи»

Рассмотрим задачу: на основе результатов проведения экспериментов с объектами, надо определить параметры уравнений, которые описывают процессы с этим объектом. В технике такой называется **идентификация уравнений** (в узком смысле может рассматриваться как основа явления «обучения»).

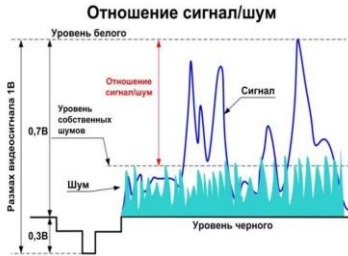
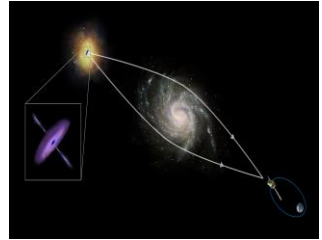
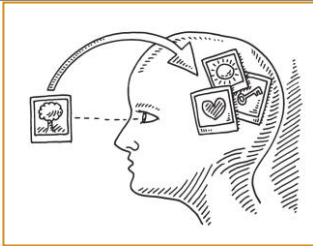
- **Проблема:** задача «идентификации» не корректна по Адамару.... любые измерения физических величин всегда искажены случайными ошибками.

Надо понять

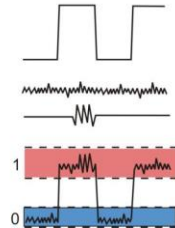
- как случайные ошибки измерений **влиять** на результат
- Как сделать так, чтобы случайные искажения не могли **исказить** результат

Для решения «обратных задач» необходимо использовать **некоторую дополнительную информацию** о свойствах решения, которая «напрямую» в **условиях самой задачи не содержится**. Формально, использование априорной информации это некоторое «насилие» **над «презумпцией «непрерывности» реальности**, принуждающее законы природы **выглядеть удобным для нас**

Существенная проблема наблюдений — искажения, вносимые случайными помехами и наблюдателем



Аналоговый сигнал



Цифровой сигнал

Возвратимся к определениям: «Объект машинного обучения»

Поясняющий комментарий: В науке и технике **термин «объект исследования» обозначает существующее** в окружающем мире

- **явления**, предметы, область знаний, технологии.....
- К было отмечено выше, суть **явления** обучения – поддержание «актуального» состояния оператора непрерывного отображения... «воспринимаемых данных» на «мыслимые классы понятий». Поэтому, **объектом машинного обучения** являются –
 - компьютерные технологии исследования «многомерных ... мультимодальных данных» на основе решения специального **класса обратных задач** с помощью построения операторов **регрессии** (прогноза числовых значений), **классификации** (отображения данных в нарративы), **кластеризации** (построения гомоморфных отображений) для регуляризация, которых используется различная априорная информация

Уточнения: Прямые и Обратные задачи

- **прямые задачи** - описание явлений, процессов и объектов на основе заданных с **помощью алгоритмов, правил или уравнений** причинно-следственных связей
- **обратные задачи** - обращение причинно-следственных связей – т.е. описание неизвестных правил (уравнений) на основе анализа известных следствий (воспринимаемых данных) Эти задачи решаются с помощью :
 - алгоритмов регуляризации (учет законов физики)
 - процессов обучения (методы индукции и дедукции)

Уточнение:

В обучении существует *два подхода* :

- **Эксплицитные** - **с объяснением правил** (от лат. explicitum – «явно выраженный», «развернутый») на основе ясных понятий, простых и точных правил
- **Имплицитные** - **без объяснения правил** (от лат. implicitum — «невывраженный», «подразумеваемый») на основе субъективных оценок

И два метода

- само-обучение или от единичного (конкретного) факта – к общему пониманию.
- учителем или от общего понимания – к частному (конкретному) объяснению

Машинное обучение – это область компьютерных технологий **автоматизации решения обратных задач** исследования данных, для решения которых используются как

- дедуктивные методы обучения (на основе логических выводов), которые предполагают априорную формализацию в виде экспертной базы знаний

так и

- индуктивные методы обучение на основе выявления общих закономерностей (знаний) по прецедентам, опытным путем с использованием эмпирически полученных данных

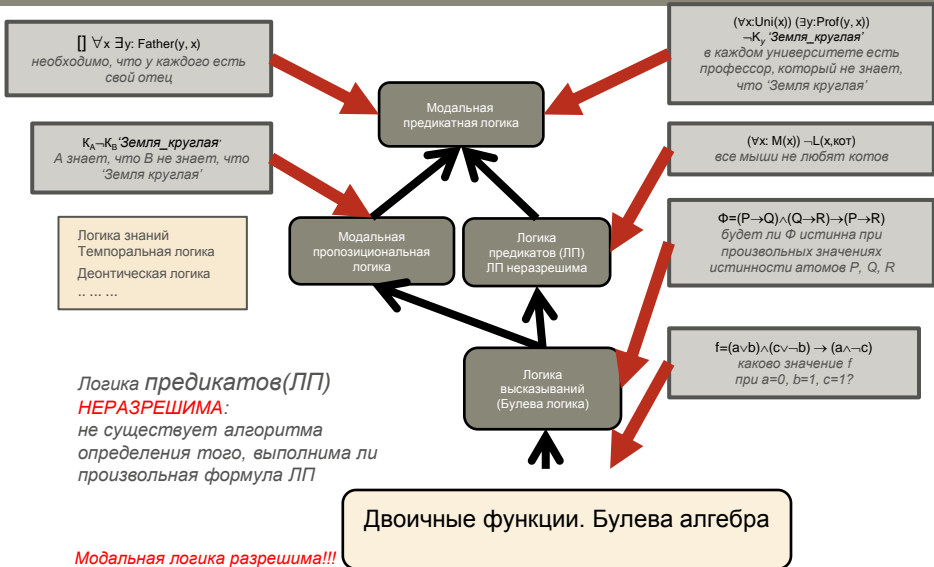
Можно сказать то, что **реально существует** - это **объект исследований**, а то, что описывает как это **может существовать** – это **предмет** исследований.

- Например, если рассматриваемая область знаний информационные технологии, то
 - - объектом исследования могут быть – **базы знаний**
 - а
 - - предметом исследования - **методы логического вывода**

Исторические аспекты процесса обучения: от логики Аристотеля до модальных и нечетких логик .

- Логика познания Аристотеля: **необходимо, возможно, случайно**
- Логика обучения средние века: **должен знать, полагает, было, будет знать, обязательно будет знать, разрешено узнать**
- Логика актуальности знаний нового времени: **«было», «есть» и «будет», «Раньше», «позже» и «одновременно»**
- Логика истины в философии позитивизма: **истинно всегда, «неопределенно», «всегда ложно» или «...более вероятно, чем...»**
- Методология «машинного» обучения: **«статистически возможно», «логически невозможно», «...логически следует...»**

Итак, существует много логик обучения



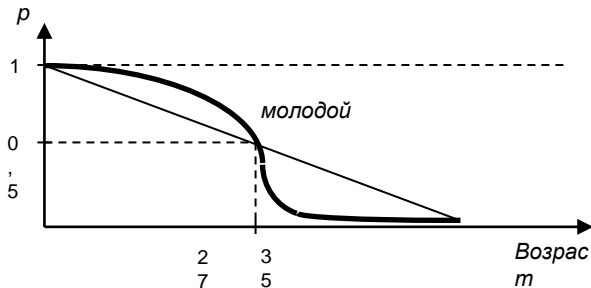
Проблема формализации знаний и принцип дополнительности

- Не существует одной, “ПРАВИЛЬНОЙ” системы формализации сложных понятий и явлений. Часто такие понятия определяются с учетом контекста т.е. *“зависит от выбора модели, которая описывает ситуацию”*.
- Формализации явления обучения для различных проблем может отличаться. В физике огромное число базовых понятий определяется с помощью формальных систем или аксиом. Но даже в физике нет точного понятия, например, что есть “сила”?
- Применительно к явлению обучения можно утверждать следующее.
 - Понятие ‘обучение’ в разных контекстах различно: *“У каждого свое понимание чему, кого и как надо учить”*.
 - Более того нет формального понятия “знания” и какова цель процесса обучения.....

Функции контекста или «нечеткой логики» принадлежности

При использовании нечеткой логики нужно выбрать функцию принадлежности. Пример: Петру 35 лет. Насколько истинно предположение, что он *молодой*?

Равна ли его «истинность» этого предположения величине 0.5, поскольку он прожил примерно половину жизни, или истинность равна 0.6?



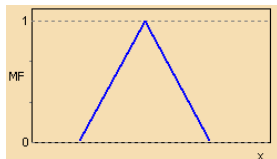
Какова должна быть функция принадлежности, каков должен быть вид графика этой функции (кривая или прямая)?

Варианты выбора функции принадлежности

Треугольная функция принадлежности определяется тройкой чисел (a,b,c) , и ее значение в точке x вычисляется согласно выражению:

$$MF(x) = \begin{cases} 1 - \frac{b-x}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ 1 - \frac{x-b}{c-b}, & b \leq x \leq c \\ 0, & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

При $(b-a)=(c-b)$ имеем случай симметричной треугольной функции принадлежности, которая может быть однозначно задана двумя параметрами из тройки (a,b,c) .

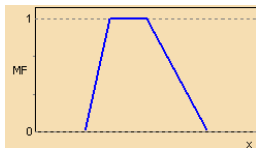


Варианты выбора функции принадлежности

Аналогично для задания трапециевидальной функции принадлежности необходима четверка чисел (a,b,c,d):

$$MF(x) = \begin{cases} 1 - \frac{b-x}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ 1, & b \leq x \leq c \\ 1 - \frac{x-c}{d-c}, & c \leq x \leq d \\ 0, & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

При $(b-a)=(d-c)$ трапециевидальная функция принадлежности принимает симметричный вид.

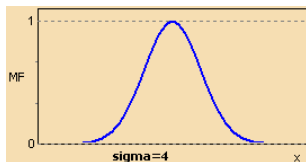


Проблема выбора функции принадлежности

Функция принадлежности гауссова типа (нормальное распределение) описывается формулой

$$MF(x) = \exp\left[-\left(\frac{x - c}{\sigma}\right)^2\right]$$

и оперирует двумя параметрами. Параметр c обозначает центр нечеткого множества, а параметр σ отвечает за крутизну функции.



Описание исследуемых данных в прикладных задачах машинного обучения

Задачи регрессии (regression):

$$Y = \mathbb{R} \text{ или } Y = \mathbb{R}^m$$

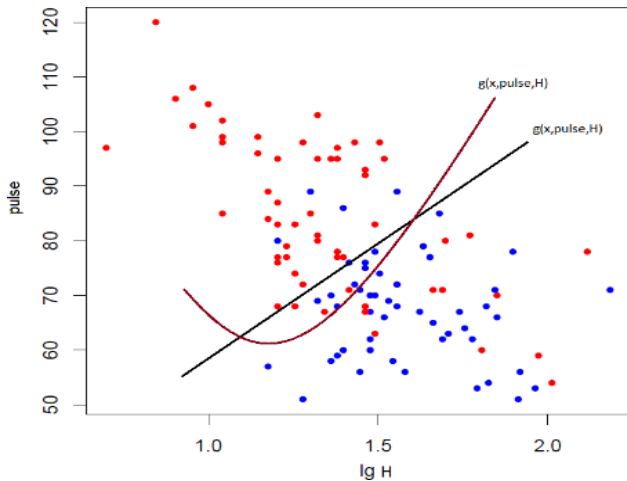
Задачи классификации (classification):

$Y = \{-1, +1\}$ - классификация на 2 класса

$Y = \{1, \dots, M\}$ - на M непересекающихся классов

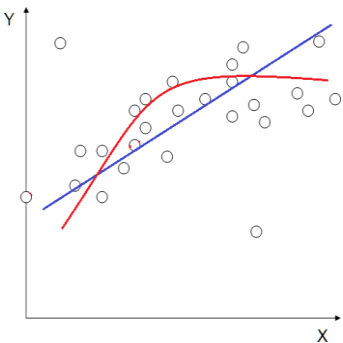
$Y = \{0, 1\}^M$ - на M классов, которые могут пересекаться

Задача классификация на примере экспериментальных данных «пульс-давление»

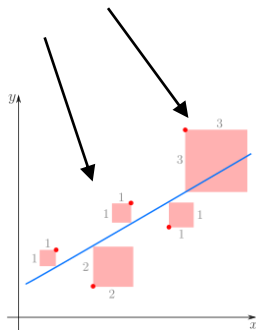
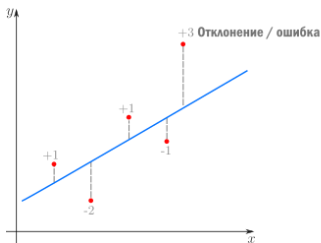


Решение-
функция
разделения $g(x,$
 $pulse, H)$
облака
эксперименталь
ных данных
на «больные» и
«здоровые»

Оператор регрессии – описание «общей» тенденции изменения данных

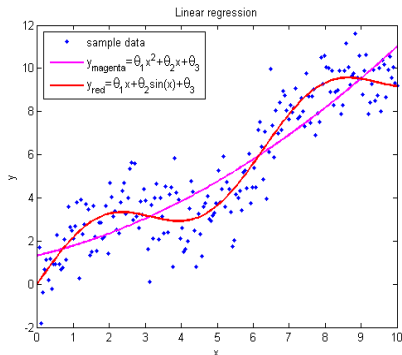


Регрессия (возврат к «среднему» значению) — способ выбрать из семейства функций ту, которая минимизирует функцию потерь отклонения от «среднего» в заданных точках



Пример: задача регрессии на примере синтетических данных

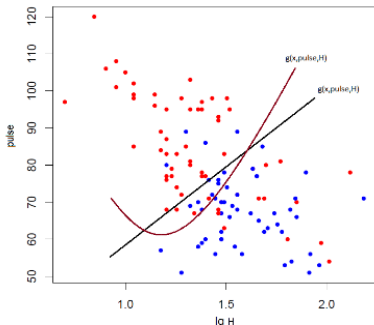
$X = Y = \mathbb{R}$, число точек $\epsilon = 200$, $n = 3$ количество признаков : $\{x, x^2, 1\}$ или $\{x, \sin x, 1\}$



наличие признаков (feature generation) усложняет модель, но на практике важно "правильно угадать" уровень сложности модели

Модель данных как параметрическое семейство функций

- Моделью алгоритма **a** называется параметрическое семейство функций $g : X \rightarrow Y$ или $g(x, \theta)$, где $\theta \in \Theta$ параметры в пространстве параметров.
- Процесс подбора оптимальной функции g и оптимальных параметров θ по обучающей выборке называют настройкой (tuning) или обучением (training) алгоритма **a**.

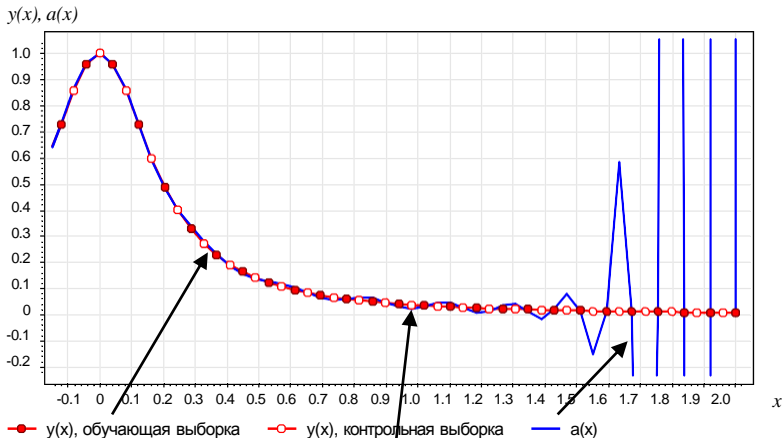


Проблемы МО: переобучения и недообучения

- Переобучение (overfitting) - нежелательное явление, возникающее при решении задач обучения по прецедентам, когда вероятность ошибки обученного алгоритма на объектах тестовой выборки оказывается существенно выше, чем средняя ошибка на обучающей выборке.
- Переобучение возникает при использовании избыточно сложных моделей.
 - Недообучение - нежелательное явление, возникающее при решении задач обучения по прецедентам, когда алгоритм обучения не обеспечивает достаточно малой величины средней ошибки на обучающей выборке.
- Недообучение возникает при использовании недостаточно сложных моделей.

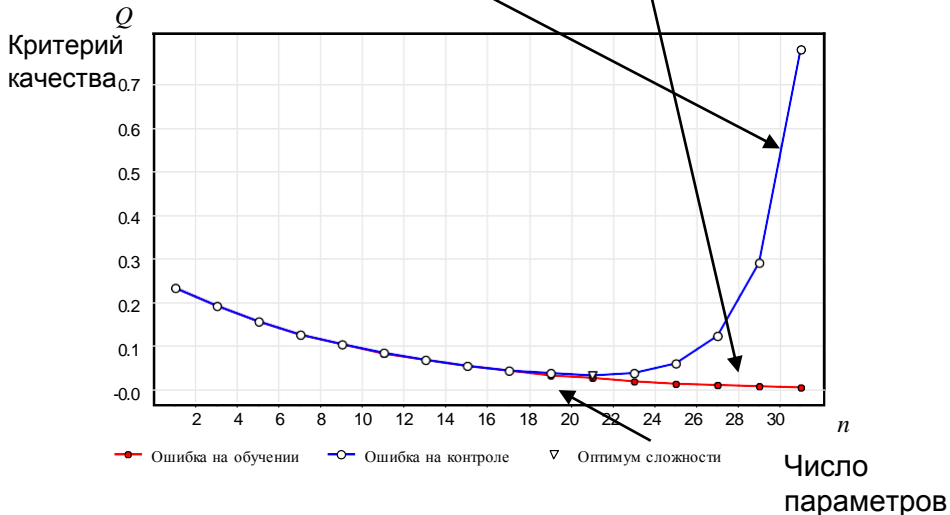
Проблема переобучения (построение модели данных по 38 точкам обучающей выборки с помощью полинома порядка 50)

$y(x) = \frac{1}{1 + 25x^2}$; Используется $a(x)$ - полином степени $n = 38$

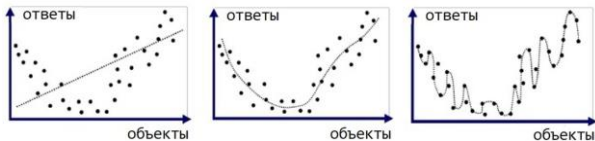


Пример. Зависимость критерия качества приближения Q от степени полинома n

Переобучение - это когда $Q(\mu(X^k), X^k) \gg Q(\mu(X), X)$:

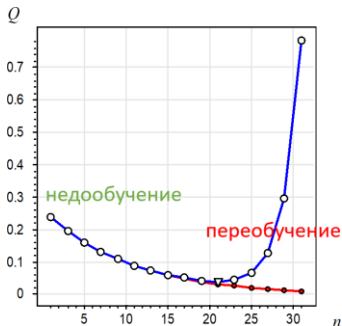


Проблемы недообучения и переобучения в задачах построения модели данных



недообучение хорошо обученная модель переобучение

- Недообучение** (underfitting): модель слишком проста, недостаточное число параметров n
- Переобучение** (overfitting): модель слишком сложна, избыточное число параметров n



Вывод.

- 1 Из-за чего возникает переобучение?
 - Избыточное число параметров в модели $g(x, \theta)$ «расходятся» на чрезмерно точную подгонку под обучающую выборку
 - выбор a из A производится по неполной информации X
- 2 Как обнаружить переобучение?
 - Эмпирическим, путём разбиения выборки на **train** и **test** (на test должны быть известны правильные ответы)
- 3 Избавиться от переобучения нельзя, но последствия можно минимизировать тем, что
 - накладывать ограничения на θ (регуляризация)
 - минимизировать только одну из теоретических оценок
 - выбирать модель (model selection) на основе априорных знаний
 - «развивать» обобщающие способности (generalization performance)

Литература по теме «МО в медицине»

1. Utkin L.V., Konstantinov A.V. Attention-based random forest and contamination model // Neural Networks. vol. 154, pp. 346359, 2022
2. Utkin L.V., Satyukov E.D., Konstantinov A.V. SurvNAM: The machine learning survival model explanation // Neural Networks, Vol.147, pp. 81-102. 2022
3. Kovalev M.S., Utkin L.V., Kasimov E.M. SurvLIME: A method for explaining machine learning survival models // Knowledge-Based Systems, vol. 203, p. 106164, 2020.
4. Kovalev M.S., Utkin L.V. A robust algorithm for explaining unreliable machine learning survival models using the Kolmogorov-Smirnov bounds // Neural Networks, vol. 132, pp. 1-18, 2020.
5. Konstantinov A.V., Utkin L.V. Interpretable machine learning with an ensemble of gradient boosting machines // Knowledge-Based Systems, vol. 222, p.106993 2021.
6. Utkin L.V., Zaborovskiy V.S., Kovalev M.S., Konstantinov A.V.