Список літератури

1. Berument H. The effects of different inflation risk prepius on interest rate spreads / Hakan Berument, Zubeyir Kilinc, Umit Ozlale // Physica A. – 2004. – Vol. 333. – P. 317–324.
2. Chornei R. K. Control of Spatially Structured Random Processes and Random Fields with Applications / Ruslan K. Chornei, Hans Daduna, Pavel S. Knopov. – New York : Springer Science + Business Media, Inc., 2006. – 261 p.
3. González-Hernández J. Markov control processes with randomized discounted cost / Juan González-Hernández, Raquiel R. López-Martínez, J. Rubén Pérez-Hernández // Math. Meth. Oper. Res. – 2007. – Vol. 65, № 1. – P. 27–44.
4. Gil-Alana L. A. Modelling the U.S. interest rate in terms of I(d) statistical models / Luis Alberiko Gil-Alana // Quarterly Review of Economics & Finance. – 2004. – Vol. 44, № 4. – P. 475–486.
5. Hernández-Lerma O. Discrete-time Markov control processes: basic optimality criteria / O. Hernández-Lerma, J. B. Lasserre. – Berlin Heidelberg New York : Springer, 1996. – 216 p.
6. Newell R. G. Discounting the distant future: how much do uncertain rates increase valuations? / Richard G. Newell, William A. Pizer // Journal of Environmental Economics and Management. – 2003. – Vol. 46, № 1 – P. 52–71.

N. Kovalchuk., R. Chornei

SEMI-MARKOV DECISION-MAKING PROCESSES WITH RANDOMIZED DISCOUNT

In this paper we consider semi-Markov decision processes with randomized discounted factors. We find sufficient conditions for the existence and uniqueness of optimal stationary nonrandomized strategies for control these processes on finite and infinite horizon.

Keywords: Decision-making processes, semi-Markov processes, randomized discount, optimality equation.

Матеріал надійшов 07.08.2013

УДК 519.7

Галкін О. А.

АВТОМАТИЧНИЙ ВИБІР ПАРАМЕТРІВ ЯДРА ОПОРНО-ВЕКТОРНИХ МАШИН

Досліджено методологію автоматичного вибору параметрів ядра опорно-векторних машин. Використано метод градієнтного спуску для мінімізації оцінок тестової похибки. Отримано гладку апроксимацію тестової помилки з використанням оцінки апостеріорних ймовірностей. Запропоновано та реалізовано алгоритм, де градієнтним кроком є напрямок градієнта в просторі параметрів. Проведено експериментальні дослідження для оцінки ефективності запропонованого методу.

Ключові слова: ядро, метод градієнтного спуску, згладжування оцінок, гладка апроксимація тестової помилки, множина перевірки.

Вступ

Алгоритм опорно-векторних машин (ОВМ) залежить від кількох параметрів. Один із них, що позначається через C, контролює відповідність між максимізацією поля та мінімізацією помилки. Інші параметри знаходяться в нелінійному відображенні у простір характеристик. Вони називаються *параметрами ядра*.

Зазвичай, встановлення параметрів здійснюється з використанням мінімаксного підходу, який полягає в максимізації поля по коефіцієнтах гіперплощини та зведенні до мінімуму оцінки помилки узагальнення по множині параметрів ядра. Однак, коли є множина параметрів, класична стратегія, що ґрунтується на методі перебору в просторі параметрів, стає нерозв'язною,

© Галкін О. А., 2013

оскільки вона буде відповідати виконанню алгоритму на кожному можливому значенні вектора параметрів (до певної дискретизації). Замість цього ми пропонуємо виконувати такий перебір, використовуючи метод градієнтного спуску.

Квадратичні втрати

Ми будемо досліджувати слабке поле ОВМ з квадратичною пеналізацією помилок, що можна розглядати як окремий випадок версії жорсткого поля з модифікованим ядром [3].

$$\mathrm{K} \leftarrow \mathrm{K} + \frac{1}{C}\mathrm{I}, \qquad (1)$$

де I є одиничною матрицею, а C є постійною величиною, що пеналізує навчальні помилки. Надалі ми зосередимось на жорсткому полі ОВМ і використаємо (1) під час аналізу випадку нероздільних даних. Таким чином, C буде розглядатися як ще один параметр функції ядра.

Такий підхід можна інтуїтивно зрозуміти так [5]: n додаткових віртуальних компонентів додаються у простір характеристик, а модифіковане відображення визначається так:

$$\tilde{\Phi}(x_i)^T = (\Phi(x_i) \quad 0 \quad \ldots \quad y_i/\sqrt{C} \quad \ldots \quad 0).$$

i і n позиція

Вводячи:

$$\tilde{w}^T = (w \quad \xi_1\sqrt{C} \quad \ldots \quad \xi_n\sqrt{C}),$$

ми отримуємо:

$$\tilde{w}^2 = w^2 + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i^2,$$

$$y_i(\tilde{w}\cdot\tilde{\Phi}(x_i)+b) \geq 1 \Leftrightarrow y_i(w\cdot\Phi(x_i)+b) \geq 1-\xi_i.$$

Важливо підкреслити, що навчання жорсткого поля ОВМ в модифікованому просторі характеристик є еквівалентним навчанню слабкого поля ОВМ з квадратичною пеналізацією слабких змінних. Нове ядро має вигляд:

$$\tilde{\mathrm{K}}_{ij} = \tilde{\Phi}(x_i)\cdot\tilde{\Phi}(x_j) = \mathrm{K}_{ij} + \delta_{ij}/C.$$

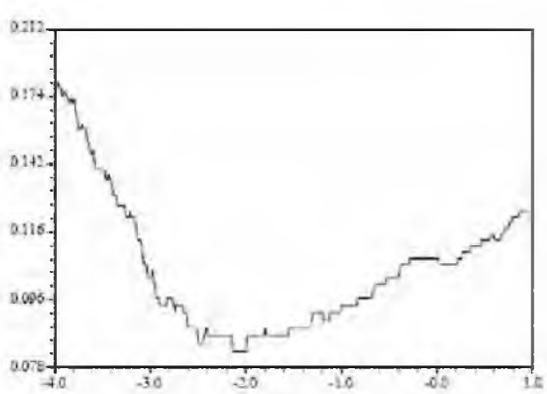
Відзначимо також, що з $\tilde{w} = \sum\alpha_i^0 y_i\tilde{\Phi}(x_i)$ слідує:

$$\xi_i C = \alpha_i^0.$$

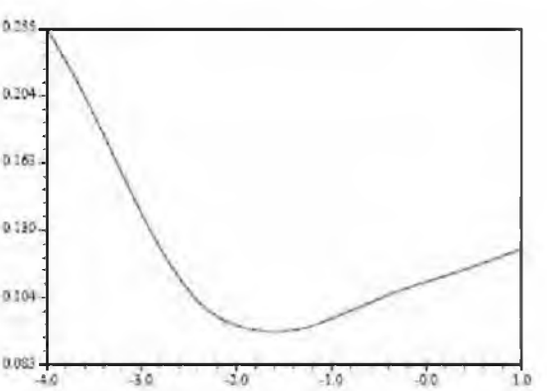
Згладжування оцінок тестової похибки

Оцінка продуктивності ОВМ з використанням помилки перевірки ($T = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\Psi(-y_i' f(x_i'))$), або ж помилки пропуску ($L(x_1,y_1,\ldots,x_n,y_n) = \sum_{p=1}^{n}\Psi(-y_p f^p(x_p))$) вимагає використання функції кроку Ψ. Однак ми будемо використовувати *метод градієнтного спуску* для мінімізації оцінок тестової похибки. На жаль, функція кроку не є диференційованою, однак існує можливість обмежити $\Psi(x-1)$ по x для $x \geq 0$. Наслідком є отримання обмеження R^2/M^2 з помилки пропуску. Незважаючи на можливість обмеження $\Psi(x-1)$ по x ($x \geq 0$), великі помилки трапляються частіше одного разу, тому кориснішим є використання функції узгодження такого вигляду (рис. 1):

$$\Psi(x) = (1+\exp(-Ax+B))^{-1}.$$



1



2

Рис. 1. Помилка перевірки для різних значень ширини (в логарифмічній шкалі) радіальної функції ядра: *1* – функція кроку $\Psi(x) = 1_{x>0}$; *2* – сигмоїдна функція

$$\Psi(x) = (1+\exp(-5x))^{-1}$$

Однак вибір постійних величин A та B є непростою задачею. Якщо значення A є занадто малим, тоді оцінка не є точною, якщо ж значення A є занадто великим, отримана оцінка не є гладкою.

Замість того, щоб підбирати відповідні постійні величини A та B, можна спробувати безпо-

середньо отримати гладку апроксимацію тестової помилки, оцінюючи апостеріорні ймовірності. Нещодавно запропоновано таку оцінку апостеріорного розподілу $P(Y=1|X=x)$ виходу ОВМ $f(x)$ [6]:

$$\tilde{P}_{A,B}(x)=\tilde{P}(Y=1|X=x)=\frac{1}{1+\exp(Af(x)+B)},$$

де $f(x)$ є виходом ОВМ. Постійні величини A та B знаходяться при мінімізації відстані Кульбака – Лейблера між $\tilde{P}$ та емпіричною оцінкою P, що будується з множини перевірки $(x_i',y_i')_{1\le i\le n_v}$:

$$(A^*,B^*)=\arg\max_{A,B}\sum_{i=1}^{n_v}(\frac{1+y_i'}{2}\log(\tilde{P}_{A,B}(x_i'))+$$

$$+\frac{1-y_i'}{2}\log(1-\tilde{P}_{A,B}(x_i'))). \qquad (2)$$

Ця оптимізація здійснюється за допомогою алгоритму градієнтного спуску другого порядку [6].

Відповідно до цієї оцінки, найкращий поріг для нашого класифікатора ОВМ f є такий, що:

$$f(x)=\mathrm{sgn}(\tilde{P}_{A^*,B^*}(x)-0.5).$$

Варто зауважити, якщо $B^*\neq 0$, ми отримуємо певну корекцію, порівняно зі звичайним порогом ОВМ. Відповідно до визначення, помилкою узагальнення нашого класифікатора є:

$$P(Y\neq f(X))=\int_{x,f(x)=-1}P(Y=1|x)d\mu(x)+$$

$$+\int_{x,f(x)=1}(Y=-1|x)d\mu(x).$$

Ця помилка може бути емпірично оцінена таким чином:

$$P(Y\neq f(X))\approx\sum_{i,\tilde{P}(x_i')<0.5}\tilde{P}(x_i')+\sum_{i,\tilde{P}(x_i')>0.5}1-\tilde{P}(x_i')=$$

$$=\sum_{i=1}^{n_v}\min(\tilde{P}(x_i'),1-\tilde{P}(x_i')).$$

Варто звернути увагу на те, що мітки на множині перевірки не використовуються на останньому кроці безпосередньо, а використовуються опосередковано через оцінки постійних величин A та B, що входять у параметричну форму $\tilde{P}_{A^*,B^*}$. Для кращого розуміння цієї оцінки розглянемо граничний випадок, коли помилки на множині перевірки немає. Алгоритм максимальної ймовірності призведе до того, що $A=-\infty$, а $\tilde{P}_{A^*,B^*}(x)$ буде приймати лише двійкові значення. Як наслідок, оцінка ймовірнісної помилки дорівнюватиме нулю.

Якщо множина перевірки є недоступною, для знаходження значень A^* та B^* можна використовувати навчальну множину, мінімізуючи функціонал (2), однак це рівнозначно оцінці згладженої навчальної помилки. Прийнятним способом оцінки згладженої помилки узагальнення є використання процедури пропуску: знайти A^* та B^*, які мінімізують (2) з $x_p'=x_p, y_p'=y_p$ та модифіковану версію апостеріорної ймовірності:

$$\tilde{P}_{A,B}(x_p)=\frac{1}{1+\exp(Af^p(x_p)+B)},$$

де f^p є функцією навчання за умови, якщо точка x_p була видалена з навчальної множини. $f^p(x_p)$ може бути точно оцінена, використовуючи рівняння:

$t_n=\frac{1}{n}L(x_1,y_1,...,x_n,y_n)=\frac{1}{n}Card\{p:\alpha_p^0S_p^2\ge y_pf^0(x_p)\}$, як:

$$f^p(x_p)\approx f^0(x_p)-y_p\alpha_p^0S_p^2.$$

Іншим методом оцінки апостеріорних ймовірностей є використання оцінювача щільності вікна Парцена ($dP_{est}(x,y)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}dP_{x_i}(x)\delta_{y_i}(y)$), що використовується для обчислення локального ризику. Даний метод призводить до мінімізації наступного інтеграла:

$$\int\frac{1+y}{2}\log(\tilde{P}_{A,B}(x))+\frac{1-y}{2}\log(1-\tilde{P}_{A,B}(x))dP_{est}(x,y).$$

Недоліком такого методу є те, що вибір ширини оцінювача вікна Парцена має вирішальне значення, а її знаходження має здійснюватись за допомогою перевірки або процедури пропуску.

Оптимізація параметрів ядра

Беручи за основу алгоритм ОВМ, ми припускаємо, що ядро K залежить від одного чи декількох параметрів, закодованих у вектор $\theta=(\theta_1,...,\theta_n)$. Отже, розглянемо клас функцій рішення, що параметризовані α,b та θ:

$$f_{\alpha,b,\theta}(x)=sign(\sum_{i=1}^{n}\alpha_iy_iK_\theta(x,x_i)+b).$$

Нашою метою є вибір таких значень параметрів α та θ, при яких значення W ($W(\alpha)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n}\alpha_i\alpha_jy_iy_jx_i\cdot x_j$) є максимальним (алгоритм максимального поля), а значення T (критерій вибору моделі) зводиться до мінімуму (найкращі параметри ядра). Тобто для фіксованого θ, ми хочемо отримати $\alpha^0=\arg\max W(\alpha)$

та вибрати таке θ^0, що:

$$\theta^0 = \arg\min_{\theta} T(\alpha^0, \theta).$$

У випадку, коли θ є одновимірним параметром, зазвичай, мають справу з кінцевим числом значень, з яких вибирають те значення, яке дає найменше значення критерію T. Однак, слід зауважити, що коли T та рішення ОВМ є неперервними відносно θ, існує ефективніший підхід [4]: використовуючи алгоритм інкрементної оптимізації, можна навчати ОВМ з невеликими зусиллями, коли θ змінюється на невелику величину. Однак, як тільки θ буде мати більше одного компонента, обчислення $T(\alpha,\theta)$ для кожного можливого значення θ стає нерозв'язним, тому важливо знайти спосіб оптимізації T вздовж траєкторії в просторі параметрів ядра.

Використання градієнта як критерію вибору моделі для оптимізації параметрів моделі було запропоновано в [1] та продемонстровано для випадку лінійної регресії та прогнозування часових рядів. Крім того, дане використання було запропоновано для оптимізації параметрів регуляризації нейронної мережі.

Далі ми пропонуємо алгоритм, який є альтернативою до оптимізації ОВМ, де градієнтним кроком є напрямок градієнта T у просторі параметрів. Це може бути досягнуто з використанням такої ітераційної процедури:

1. *Ініціалізація θ до деякого значення.*
2. *Використання стандартного алгоритму ОВМ для знаходження максимуму квадратичної форми W:*

$$\alpha^0(\theta) = \arg\max_{\alpha} W(\alpha,\theta).$$

3. *Обновлення параметрів θ таким чином, щоб T було зведено до мінімуму. Це, зазвичай, досягається за допомогою градієнтного кроку.*
4. *Повернення до кроку 2 або зупинка, якщо досягнуто мінімуму T.*

Рішення кроку 3 вимагає оцінки того, як T варіюється з θ. Таким чином, ми обмежимося випадком, коли величина K_θ може бути диференційована відносно θ. Крім того, ми будемо розглядати тільки випадки, коли може бути обчислений (або наближений) градієнт T відносно θ.

Зауважимо, що α^0 неявно залежить від θ, оскільки α^0 визначається як максимум W. Якщо ми маємо k параметрів ядра $(\theta_1,\ldots,\theta_k)$, повною похідною від $T^0(\cdot) \equiv T(\alpha^0(\cdot),\cdot)$ відносно θ_p є:

$$\frac{\partial T^0}{\partial \theta_p} = \frac{\partial T^0}{\partial \theta_p}\Big|_{\alpha^0\_фікс.} + \frac{\partial T^0}{\partial \alpha^0}\cdot\frac{\partial \alpha^0}{\partial \theta_p}.$$

Обчисливши градієнт $\nabla_\theta T^0$, способом виконання кроку 3 є застосування *градієнтного кроку*:

$$\delta\theta = -\varepsilon \nabla_\theta T^0,$$

для деяких малих та в кінцевому підсумку зменшуваних ε. Збіжність може бути покращено з використанням похідних другого порядку (метод Ньютона):

$$\delta\theta = -(\Delta_\theta T^0)^{-1} \nabla_\theta T^0,$$

де оператор Лапласа Δ визначається таким чином:

$$(\Delta_\theta T^0)_{i,j} = \frac{\partial^2 T^0}{\partial\theta_i \partial\theta_j}.$$

У такому формулюванні додаткові обмеження можуть бути накладені через проекцію градієнта.

Експериментальні дослідження й аналіз результатів

Експериментальні дослідження було проведено для оцінки ефективності та придатності нашого методу. Експеримент полягав в автоматичному знаходженні оптимального значення двох параметрів: ширини радіального ядра та постійної величини C в рівнянні (1). В основі методології, яка безпосередньо використовувалась в експерименті, був алгоритм градієнтного спуску, реалізацію якого здійснено з використанням оптимізаційного інструментарію пакету Matlab. Даний інструментарій включає обновлення другого порядку для покращення швидкості збіжності. Оскільки ми не були зацікавлені в точному значенні параметрів мінімізації функціонала, був використаний вільний критерій зупинки алгоритму.

У даному експерименті ми намагались автоматично вибрати ширину σ радіального ядра

$$K(x,y) = \exp\left(-\sum_{i=1}^{n}\frac{(x_i - y_i)^2}{2n\sigma^2}\right)$$

вздовж постійної величини C, яка пеналізує помилку навчання, що входить у рівняння (1).

Для того, щоб уникнути додавання позитивних обмежень у задачі оптимізації (для постійної величини C та ширини σ радіального ядра), ми використали параметризацію $\theta = (\log C, \log\sigma)$,

що забезпечує стабільнішу оптимізацію. Початковими значеннями були $C=1$ та $\log\sigma=-2$. Кожен компонент нормалізувався своїм стандартним відхиленням, що відповідає досить малому значенню для σ.

Ми використовували тестові бази даних, представлені в [7], а також слідували тій експериментальній процедурі, що наведена в [7]. На кожній з перших 5 навчальних множин параметри ядра оцінювались з використанням 5–кратної перехресної перевірки, мінімізації R^2/M^2 та інтервального обмеження. Врешті параметри ядра обчислювались як середнє значення з 5 оцінок. Результати представлено в таблиці 1.

У другому стовпці представлено результати з [7]. У третьому та четвертому стовпці, параметри знайдено шляхом мінімізації R^2/M^2 та з використанням алгоритму градієнтного спуску відповідно.

Зауважимо, що мінімізація R^2/M^2 та інтервальні оцінки забезпечують отримання приблизно однакових характеристик, що є так званим підбиранням параметрів, які мінімізують помилку перехресної перевірки. Цей результат є передбачуваним, оскільки перехресна перевірка є точним методом вибору гіперпараметрів будь-якого алгоритму навчання.

Більш цікавим порівнянням є обчислювальні витрати цих методів. Таблиця 2 демонструє, скільки навчань ОВМ необхідно в середньому для вибору параметрів ядра на кожному розриві. Результати для перехресної перевірки представлено в [7], де було застосовано 10 різних значень для C і σ, та проведено 5-кратну перехресну перевірку. На кожній з 5 навчальних множин, кількість навчань ОВМ, необхідних для цього методу, є $10\times10\times5=500$.

Отриманий результат оцінки складності є вражаючим: у середньому в 100 разів менше ітерацій навчання ОВМ необхідно для знаходження параметрів ядра. Основною причиною цього результату є те, що в оптимізації брали участь два параметри. Через обчислювальні складнощі метод перебору перехресної перевірки не забезпечує вибір більш ніж 2 параметрів, тоді як запропонований нами метод забезпечує такий вибір.

Висновки

Зауважимо, що враховуючи результати з [2], R^2/M^2 може здатися грубою верхньою межею інтервального обмеження, що є точною оцінкою тестової помилки. Однак у процесі вибору параметрів ядра важливим є те, щоб отримати обмеження, мінімум якого є близьким до оптимальних параметрів ядра. Навіть якщо значення R^2/M^2 не може бути використано для оцінки тестової помилки, попередній експеримент демонструє, що його мінімізація забезпечує непогані результати. Помилка узагальнення, отримана при мінімізації інтервального обмеження, є ненабагато кращою. Оскільки мінімізацію помилки узагальнення здійснити та контролювати (багато локальних мінімумів) важче, на практиці ефективніше проводити мінімізацію R^2/M^2.

Таблиця 1. **Тестові помилки, знайдені різними алгоритмами вибору параметрів C та σ ОВМ**

№ прикладу	Перехресна перевірка	R^2/M^2	Інтервальне обмеження
приклад 1	26,04±4,74	26,84±4,741	25,59±4,18
приклад 2	23,53±1,73	23,25±1,7	23,19±1,67
приклад 3	15,95±3,26	15,92±3,18	16,13±3,11
приклад 4	4,80±2,19	4,62±2,03	4,56±1,97
приклад 5	22,42±1,02	22,88±1,23	22,5±0,88

Таблиця 2. **Середня кількість навчань ОВМ з однієї навчальної множини, необхідних для вибору параметрів C та σ з використанням стандартної перехресної перевірки, мінімізації R^2/M^2 та інтервального обмеження**

№ прикладу	Перехресна перевірка	R^2/M^2	Інтервальне обмеження
приклад 1	500	14,2	7
приклад 2	500	12,2	9,8
приклад 3	500	9	6,2
приклад 4	500	3	11,6
приклад 5	500	6,8	3,4

Список літератури

1. Bengio Y. Gradient–based optimization of hyper–parameters / Y. Bengio // Neural Computation. – 2000. – Vol. 12(8).
2. Chapelle O. Model selection for support vector machines / O. Chapelle, V. Vapnik // Advances in Neural Information Processing Systems. – 1999.
3. Cortes C. Support vector network / C. Cortes, V. Vapnik // Machine learning. – 20: 1–25. – 1995.
4. Cristianini N. Dynamically adapting kernels in support vector machines / N. Cristianini, C. Campbell, J. Shawe-Taylor // Advances in Neural Information Processing Sustems. – 1999.
5. Freund Y. Large margin classification using the perceptron algorithm / Y. Freund, R. E. Schapire // Computational Learning Theory. – 1998. – P. 209–217.
6. Platt J. Probabilities for support vector machines / J. Platt // Advances in Large Margin Classifiers / ed. A. Smola, P. Bartlett, B. Schölkopf, D. Schurmans. – Cambridge, MA : MIT Press, 2000.
7. Rätsch G. Soft margins for AdaBoost / G. Rätsch, T. Onoda, K.-R. Müller // Machine Learning. – 2001. – 42(3). – P. 287–320.

O. Galkin

AUTOMATIC SELECTION OF THE PARAMETERS OF THE SUPPORT VECTOR MACHINES KERNEL

Methodology of the automatic selection of the support vector machines kernel is investigated. Gradient descent approach is used for minimizing test error estimates. A smooth approximation of the test error is obtained by estimating posterior probabilities. An algorithm is proposed and implemented where a gradient step is the direction of the gradient in the parameters space. Experiments have been carried out to assess the performance and feasibility of the proposed method.

Keywords: kernel, gradient descent approach, smooth approximation of the test error, validation set.

Матеріал надійшов 22.10.2012

УДК: 004.4

Галковська Л. О.

АЛГОРИТМИ РОЗВ'ЯЗАННЯ РОЗПОДІЛЕНОЇ ЗАДАЧІ ЗАДОВОЛЕННЯ ОБМЕЖЕНЬ

У даній роботі представлено розроблену автором класифікацію алгоритмів розв'язання розподіленої задачі задоволення обмежень. Наведено приклади представників кожного з класів, а також їх порівняльна характеристика та рекомендації щодо їх застосування для розв'язання конкретних DCSP задач.

Ключові слова: задача задоволення обмежень, розподілена задача задоволення обмежень, алгоритми локального пошуку, алгоритми конструктивного пошуку, гібридні алгоритми.

Багато задач оптимізації та пошуку можуть бути формалізовані як задачі задоволення обмежень (Constraint Satisfation Problems-CSP). Прикладом такої задачі може слугувати відома задача розфарбування графа. З поширенням концепції розподілених обчислень сформувався підклас розподілених CSP задач (Distributed Constraint Satisfaction Problem-DCSP). У багатьох випадках для їх розв'язання залучають групу незалежних виконавців (наприклад, агентів). Кожен агент оперує частиною задачі (частіше за все опікується однією змінною з задачі або однією підзадачею) і обмінюється інформацією з іншими виконавцями, з якими він пов'язаний певними умовами

© *Галковська Л. О., 2013*