

# **Прологомены к высокому искусственному интеллекту**

**Конспект лекций**

**Автор конспекта:**

**Король Михаил**

## Содержание

Лекция 1. Вводная .....	3
Лекция 2. Свойства сложных сетей. ....	4
Лекция 3. Ассортативность и дисассортативность. ....	7
Лекция 4. Идентификация степенных распределений. ....	11
Лекция 5. Метод Прюснера, Mind-Brain problem. ....	18
Лекция 6. Сложность .....	24
Лекция 7. Плоскость Энтропия-Сложность .....	29
Лекция 8. Решение ОДУ. Теория бифуркаций. ....	33
Лекция 9. Качественная теория ОДУ. Неяродифференциальные уравнения . . .	38
Лекция 10. Вариационное исчисление. ....	43
Лекция 11. Численные методы решения задач вариационного исчисления. ....	48
Лекция 12. ....	52
Лекция 13. ....	56
Лекция 14. Хаотические системы и ряды. Старший показатель Ляпунова. ....	62
Лекция 15. Энтропия Колмогорова-Синяя. ....	68
Лекция 16. Прогнозирование за горизонтом прогнозирования .....	73
Лекция 17. Методы кластеризации. ....	78

## Лекция 1. Вводная

Теги, ассоциирующиеся с высоким искусственным интеллектом:

- Многозадачность (Теория самоорганизации, Теория бифуркаций (интуиция - теория катастроф))
- Обучение (Теория адаптивных систем, Теория многоагентных систем)
- Самосознание (Theory of self, теория самоорганизации)
- Сложность (Теория сложности)
- Структурность (Теория сложных сетей)

Теория сложных сетей. Важные вопросы:

- 1) Размеры
- 2) Эволюция
- 3) Распределение графов

Степенное распределение (heavy tail distribution)

$$P(X) = C \cdot X^{-\alpha}$$

Где  $C$  - константа нормализации, обеспечивающая требование

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(X) dx = 1$$

С математической точки зрения степенные распределения порождаются неким аналогом Центральной предельной теоремы при нарушении формальных требований независимости, конечных математического ожидания и дисперсии. Более того, результат взаимодействия бесконечного числа взаимодействующих случайных величин дает нам четырех-параметрическое семейство функций плотности, который при одном конкретном наборе параметров даст нам нормальное распределение, а при всех остальных значениях параметров асимптотически при  $X \rightarrow \infty$  дадут нам одно из степенных распределений при том или ином значении  $\alpha$ .

Какими свойствами обладает данное распределение?

$$\mathbb{E}(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} xP(x) dx$$

$$Var(X) = \mathbb{E}(X - \mathbb{E}(X))^2$$

Существуют такие значения  $\alpha$ , при которых  $\mathbb{E}(X) \rightarrow \infty$ , более того, если мы снизим требования к  $\alpha$ , то мы войдем в область, где математическое ожидание конечно, а дисперсия бесконечна.

## Лекция 2. Свойства сложных сетей.

Первое свойство носит название гигантской связанной компоненты.

Наблюдение за реальными сложными сетями указывает, что они не просто эволюционируют (меняют количество ребер и вершин) но и имеют тенденцию к росту. Это позволило применить к ним классический прием естественно научного исследования, который носит название «переход к термодинамическому пределу» или «континуализация». А именно мы исследуем что происходит с объектом, если число составляющих его элементов (в данном случае вершин графа) стремится к бесконечности.

Мы, разумеется, понимаем, что реальные сложные сети конечны, но вместе с тем, мы предполагаем, что, начиная с некоторого большого  $N$ , мы можем говорить о некоторых асимптотических свойствах, то есть, начиная с некоторого достаточно большого  $N$  сложная сеть будет сохранять те же свойства, что и сеть, обладающих «бесконечным количеством вершин».

Здесь было установлено, что для всех сложных сетей мы наблюдаем несвязанность сложных сетей как графов. Сложные сети состоят из некоторого (иногда достаточно большого) количества несвязанных компонент. Но вместе с тем, из этих компонент выделяется одна, число вершин в которой по порядку совпадает с числом вершин во всем графе.

$$N_{GCC} = O(N), N \rightarrow \infty$$

В случае ориентированных графов, мы должны модифицировать понятие гигантской связанной компоненты. Она разбивается на четыре составляющих:

- 1) Гигантская сильно связанная компонента. Здесь предполагается, что из любых вершин  $i$  и  $j$  мы можем достигнуть из  $i$  вершину  $j$ , из вершины  $j$  вершину  $i$ .
- 2) Гигантская выходная компонента. Это множество вершин, в которые мы можем попасть из вершин гигантской сильно связанной компоненты.
- 3) Гигантская входная компонента. Это множество вершин, из которых мы можем попасть в вершины гигантской сильно связанной компоненты.
- 4) Так называемые усы, специальная структура, которая представляет собой линейно упорядоченную последовательность вершин, исходящих из гигантской сильно связанной компоненты.

Более того, возвращаясь к неориентированным графам, мы получаем, что для характеристики сложных сетей мы должны ввести свойство его разреженности.

Традиционно, разреженность графа характеризуют как отношение фактического числа ребер к максимально возможному.

$$\rho = \frac{E}{(N(N-1))/2}$$

При этом, мы пользуемся той же идеей перехода к термодинамическому пределу, мы смотрим, как ведет себя величина  $\rho$  не для данной конкретной сложной сети, но для последовательности сетей, с увеличивающимся размером, при  $N \rightarrow \infty$ .

Очевидно, что если граф полносвязный, или близкий к полносвязному (неразрезанный), тогда величина  $\rho$  будет вести себя как  $O(1)$ , поскольку

$$E \sim O(N^2).$$

С другой стороны, если мы имеем дело с чем-то вроде минимального остовного дерева, где  $E \sim O(N)$ , то  $\rho \rightarrow 0$ . Если мы будем наблюдать промежуточную ситуацию, где  $E \sim O(N^\alpha)$ ,  $1 < \alpha < 2$ , то мы говорим о разреженном графе. Все сложные сети являются разреженными графами.

Второе свойство носит название Малого мира.

Путем между вершинами  $i_0$  и  $i_n$  называется последовательность ребер  $(i_0, i_1), (i_1, i_2), \dots, (i_{n-1}, i_n)$  такая, что первое ребро инцидентно вершине  $i_0$ , а последнее вершине  $i_n$ . Кратчайшим путем между вершинами  $i_0$  и  $i_n$  является путь, содержащий минимальное число ребер. Далее, на основании этих конструкций мы должны построить некоторые характеристики, которые характеризуют не отдельную пару вершин, но граф в целом. А именно:

1) Диаметром графа называется максимальный из путей, где  $l_{i,j}$  — длина кратчайшего пути, соединяющего вершины  $i$  и  $j$

$$d_G = \max_{i \neq j} l_{i,j}$$

2) Эксцентриситетом вершины  $i$  мы будем называть максимальную длину кратчайшего пути, соединяющий вершины  $j$  и  $k$ , не проходящей через вершину  $i$ :

$$ec(i) = \max_{j,k \in V \setminus \{i\}} l_{j,k}$$

Эксцентриситетом вершины называется расстояние до самой дальней вершины

$$ec(i) = \max_{i \neq j} l_{i,j}$$

3) Тогда радиусом графа  $G$  будет минимальный эксцентриситет.

$$r_G = \min_i ec(i)$$

4) Самое ходовое и самое эффективное на практике – средняя длина кратчайшего пути в графе

$$\langle l \rangle = \frac{1}{N(N-1)/2} \sum_{i \neq j}^N l_{ij}$$

Если мы наблюдаем что-то вроде полносвязности ( $\langle l \rangle \sim O(1)$ ) – это простая сеть.

Если мы возьмем что-то похожее на кристаллическую решетку, это тоже будет простая сеть порядка  $O(n^{1-d})$ , где  $d$  – размерность.

Оказалось, что если расстояние ведет себя как  $O(n^\beta)$ , то речь идет о какой-то вариации простой сети.

Классическим примером сложной системы являются системы, у которых среднее расстояние – это величина порядка логарифма числа вершин.

$$\langle l \rangle \sim O(\ln N)$$

Для реализации такого рода системы нам необходимо существование специальных вершин – хабов, которые характеризуются тем, что через них проходит много кратчайших путей, эти вершины обеспечивают связность графа.

В отношении хабов, как всегда в математике, мы можем ставить две задачи:

- 1) Отыскание, обнаружение. Это прямая задача теории хабов.
- 2) Обратная задача, которая заключается в конструировании сети таким образом, что удаление даже значительного числа его хабов не приводит ни к потери связанности, ни даже к нарушению нормального функционирования сети, протекания потоков.

Если для сети выполняется такое свойство (свойство 2), то мы будем говорить, что сеть структурно устойчива (resilient). В настоящее время именно организация структурно устойчивых бесхабовых сетей является одной из наиболее значимых.

Все задачи в математике делятся на три больших класса:

- 1) Прямые задачи, есть некоторое описание реального процесса, структура, уравнение и подобное.
- 2) Обратные задачи, имеется некоторое множество наблюдений реального процесса, мы пытаемся по этим наблюдениям восстановить процесс, который имеет место в реальном мире.
- 3) Задача управления – имеется возможность каким-то образом воздействовать на объект, с которым мы работаем, и мы должны добиться того, чтобы наше воздействие приводило к желательному результату.

### Лекция 3. Ассортативность и дисассортативность.

Все сложные сети делятся на два больших класса, которые отличаются взаимоотношением хабов друг с другом.

В ассортативных сетях хабы имеют тенденцию быть связанными друг с другом непосредственно, как например это имеет место в интернете.

Дисассортативные сети характеризуются тем, что их хабы имеют тенденцию быть связанными друг с другом через цепочку не хабов (вершин с малыми степенями). К таким типам сетей относятся экологические и тропические сети (волк и тигр имеют много связей, являются хабами, но при этом напрямую друг с другом не связаны). Это отличие (фундаментальная дихотомия) является первым вопросом, на который мы должны ответить, приступая к изучению сложной сети.

Чтобы ответить на вопрос, является ли сеть ассортативной или дисассортативной, мы должны построить следующее распределение условной вероятности:

$$P(k \mid k_1, \dots, k_n)$$

где  $k$  – степень просматриваемой вершины,  $n$  – число ее соседей,  $k_1, \dots, k_n$  – их степени.

Проблема заключается в том, что любая характеристика, которую мы хотим использовать на практике, должна отвечать нескольким требованиям. Это касается не только сильного искусственного интеллекта.

- 1) Она должна измерять ту категорию, которую мы рассматриваем, при этом мы должны наблюдать не только корреляцию (в статистическом смысле) этой величины и исследуемой категории.
- 2) Мы должны уметь предъявлять логически прозрачный и ясный механизм, который объясняет, почему наша измеримая характеристика действительно описывает теоретическое понятие. Чтобы избежать конструкций в стиле «влияние лунного света на рост телеграфных столбов».
- 3) Характеристика должна быть практически измерима. Здесь мы отбрасываем ситуации, что мы можем посчитать эту статистику, но нам потребуется время вычисления суперкомпьютера сопоставима со временем существования вселенной.
- 4) Характеристика должна быть робастной (в первом приближении вычислительно устойчивой) (если мы немного изменим выборку, то значение характеристики тоже должно немного измениться)

Почему  $P(k | k_1, \dots, k_n)$  нам не подходит? Пусть в нашей сложной сети не больше ста соседей, то вообще говоря, общее число вариантов, зашитое в этой вероятности  $102^{101} \sim 10^{1000}$ , таким образом, это невычислимо. Допустим мы сделали  $10^{1000}$  наблюдений, и даже в этой ситуации мы только один раз попадем в соответствующую область вероятности, а для хорошей оценки нужно попасть в каждую область вероятности несколько сотен, тысяч раз. Из этого следует вычислительная неустойчивость. Если мы в соответствующую область попали один раз, то если мы попадем во второй раз, мы можем получить что-то другое, что является статистически неустойчивой ситуацией.

Нам нужно сделать понятие ассортативности вычислимым.

Что такое математическая статистика? Мы с вами говорим, что в прикладной математике задачи делятся на прямые, обратные, и задачи управления. Вся теория вероятности по своему построению, по своему существу, является прямой задачей. Мы постулируем вероятности неких элементарных событий и пытаемся ответить на вопрос, каковы же вероятности каких-то не элементарных событий. Математическая статистика является обратной задачей для теории вероятности. Мы пытаемся по наблюдениям оценить вероятности событий, которые представляют для нас интерес. Общая схема математической статистики состоит в формировании статистического критерия (теста), который представляет из себя алгоритм, позволяющий с ошибкой, не превосходящей заданного небольшого уровня (уровня значимости) отвечать на вопрос, верна ли некоторая статистическая гипотеза.

1) Коэффициент парной корреляции является механизмом проверки гипотезы, что две различные выборки коррелируют друг с другом.

Формально, если я имею случайную величину  $X$  и выборку  $x_1, \dots, x_n$  ей порожденной и случайную величину  $Y$  и выборку  $y_1, \dots, y_n$  ей порожденной, то выдвинув нулевую гипотезу  $H_0$ : коррелируют друг с другом против гипотезы  $H_1$ : не коррелируют / слабо коррелируют, мы должны построить величину эмперического коэффициента парной корреляции  $z_{xy}$

$$z_{xy} = \frac{Cov(x, y)}{\sqrt{Var(X)Var(Y)}}, -1 \leq z_{xy} \leq 1$$

$$Cov(x, y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$



Для того, чтобы установить, является сеть ассортативной или дисассортативной, была предложена простая и сильная идея. Пусть в качестве случайной величины  $X$  выступает степень вершины рассматриваемой сети. А в качестве случайной величины  $Y$  степень вершины, с которой данная вершина связана через любое ребро. Мы выбираем все ребра сложной сети и записываем степени инцидентных им вершин. В этой ситуации, если сеть является ассортативной, то есть хабы связаны с хабами, а малостепенные вершины связаны с малостепенными вершинами, то коэффициент парной корреляции будет большим и близким к единице. Если же напротив сеть дисассортативна, то есть хабы связаны с малостепенными вершинами, то коэффициент парной корреляции близок к  $-1$ . Если же сеть случайна, то есть она не представляет собой отражение реального физического объекта, а представляет собой некую математическую генерацию, то, соответственно, коэффициент парной корреляции будет близок к нулю.

Замечание: Такая чудесная характеристика обладает двумя недостатками

1)  $z_{xy}$  является мерой линейной связи между двумя величинами, никто не обещал, что соответствующая связь между степенью одной и другой вершины должна быть линейной. Здравый смысл подсказывает, что связь должна быть не линейной и сложной. Но это не главная проблема. С линейностью связи можно побороться, заменив коэффициент парной корреляции на коэффициенты, предназначенные для статистической оценки нелинейных связей (коэффициент корреляционного отношения и т. д.).

К сожалению оказалось, что все эти коэффициенты не робасны. Нужно придумать что-то другое.

Более робасной оказалась следующая величина:

Рассмотрим  $i$ -ую вершину сети. Пусть  $V(i)$  — множество соседних вершин, тогда

$$Knn(i, k) = \frac{1}{k_i} \sum_{j \in V(i), k_j = k} k_j$$

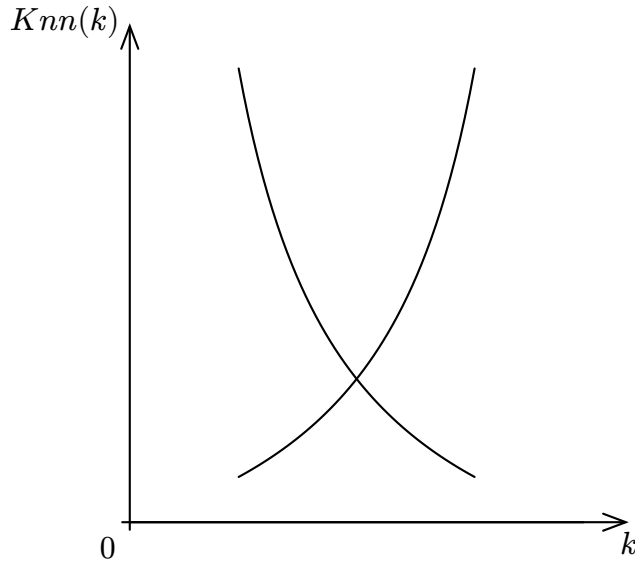
Здесь  $k_i$  — степень вершины  $i$ ,  $k_j$  — степени соседних с ней вершин, но суммирование идет не по всем соседним вершинам, но только по тем, которые имеют степень  $k$ .

$nn$  — nearest neighbours. Тогда получаем следующее:

$$Knn(k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n Knn(i, k),$$

где суммирование идет по всем вершинам сети.

Эта величина позволяет построить график



На котором ассортативные сети дадут возрастающую функцию (в идеале монотонную), а дисассортативные дадут убывающую функцию (в идеале монотонную).

Другим эффективным подходом к установлению ассортативности дисассортативности сети является Коэффициент Клуба Богатых.

Обозначим через  $N_{>k}$  число вершин, степень которых превышает  $k$ . А через  $E_{>k}$  число ребер, соединяющих две вершины, каждая из которых превышает  $k$ . Тогда:

$$\varphi(k) = \frac{E_{>k}}{N_{>k}(N_{>k} - 1) / 2}$$

В чистом виде такой характеристики оказывается недостаточно, и обычно используют нормированную величину:

$$\rho(k) = \frac{\varphi(k)}{\varphi_0(k)}$$

где  $\varphi_0(k)$  – это коэффициент клуба богатых для случайного графа.

#### Определение степенных распределений в сложных сетях.

Мы говорим, что базовой характеристикой, отличающей сложные сети от других типов графов, является то, что всевозможные распределения характеристик являются степенными функциями распределения. Соответственно, для практической работы со сложными сетями необходимо уметь отличать степенные распределения от других распределений.

## Лекция 4. Идентификация степенных распределений.

Базовой задачей, при установлении того факта, что граф, с которым мы имеем дело является сложной сетью, является задача идентификация степенных распределений, а именно установление того «простого» факта, что данная выборка порождена степенным распределением. Математически такая задача является задачей математической статистики. Но работа со степенными распределениями не входит в стандартный курс.

Мы имеем выборку, то есть набор н.о.р.с.в  $(\xi_1, \dots, \xi_n)_{iid}$ . Мы можем ставить в отношении этой выборки два вопроса:

1) Мы предполагаем, что выборка этих величин порождена неким конкретным распределением, класс которого нам известен. Например, это выборка из нормального распределения. Но мы не знаем параметры этого распределения. Мы хотим проверить гипотезу о параметрах этого распределения.

$$N(a, \sigma^2); H_0 : a = a_0$$

Другой, более важный для нас вопрос:

2) В реальных сложных системах мы обычно не знаем класс распределения, которым порождена наша выборка. Соответственно, второй вопрос, к какому классу распределений принадлежит распределение, породившее нашу выборку.

Мы можем «попытаться» проверить статистическую гипотезу о том, что распределение, породившее выборку, это некое конкретное распределение, за этой выборкой стоит некий конкретный вероятностный закон.

$$H_0 : F = F_0$$

При этом мы не ограничиваем себя каким-то конкретным классом распределений. Любая функция, удовлетворяющая требованиям функции распределения.

В первом случае говорят о параметрической статистике, потому что выдвигаемые гипотезы касаются параметров распределения, класс распределения мы знаем.

Во втором случае говорят о непараметрической статистике, потому что выдвигаемые гипотезы касаются распределения как такового. Иногда употребляют англоязычный термин goodness-of-fit test, проверка гипотезы, насколько данная выборка соответствует данному распределению.

При работе со степенными распределениями является первым и более важным является ответ на второй вопрос. Должны ли мы работать с этой выборкой как с выборкой из степенного распределения, должны ли мы предполагать, что мы можем каким-то образом оценить параметры степенного распределения, исходя из того, что мы действительно имеем дело со степенным распределением

Оказалось, что даже классических методов непараметрической статистики недостаточно. Сколько нибудь эффективные методы работы со степенными распределениями появились в последние 15 лет, поэтому, они обычно не входят в классический курс математической статистики.

Вспомним, что такое степенное распределение:

$$P(x) = C \cdot x^{-\alpha}$$

Где  $\alpha$  является параметром распределения, а  $C$  - константой нормализации, гарантирующей нам, что:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(X) dx = 1$$

Соответственно, когда мы говорим о оценке параметров степенного распределения, мы на самом деле оцениваем один параметр –  $\alpha$ , а  $C$  просто определяется из условия.

Какие подходы мы можем указать для решения задачи идентификации, является ли наша выборка выборкой из степенного распределения?

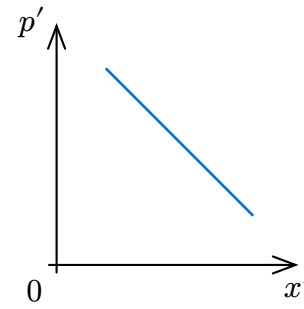
Первый метод носит название Метод Хилла (Hill), он базируется на переходе к двойному логарифмическому масштабу. Если мы прологарифмируем выражение плотности для степенного распределения, мы получим:

$$P(x) = C \cdot x^{-\alpha}$$

$$\underbrace{\ln P}_{p'} = \underbrace{\ln C}_{C'} - \alpha \underbrace{\ln x}_{x'}$$

$$p' = C' - \alpha x'$$

Соответственно, если мы нарисуем в этих новых координатах нашу зависимость, то это должен быть отрезок прямой с отрицательным коэффициентом наклона, в том случае, если верна наша нулевая гипотеза о том, что мы имеем дело со степенным распределением.



Более формально, можно предложить следующее развитие метода Хилла: давайте оценим параметры  $C'$  и  $\alpha$  с помощью МНК или метода максимального правдоподобия.

МНК: из выборки имеем  $p'_1, \dots, p'_n, x'_1, \dots, x'_n$ , тогда давайте посчитаем минимум следующей функции:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (p'_i - C' - \alpha x'_i)^2 \rightarrow \min$$

где  $n$  – размеры выборки. Отсюда, дифференцируя по  $C'$  и  $\alpha$  ( $p'_i$  и  $x'_i$  нам известны) мы находим выражения для оценки  $C'$  и  $\alpha$ , которые минимизируют это выражение. Если окажется, что полученная таким образом оценка (оценка методом наименьших квадратов) действительно делает этот квадратичный функционал малым, то это означает, что, во-первых, мы нашли хорошие оценки этих двух параметров, а во-вторых, что у нас действительно имеет место степенной закон распределения.

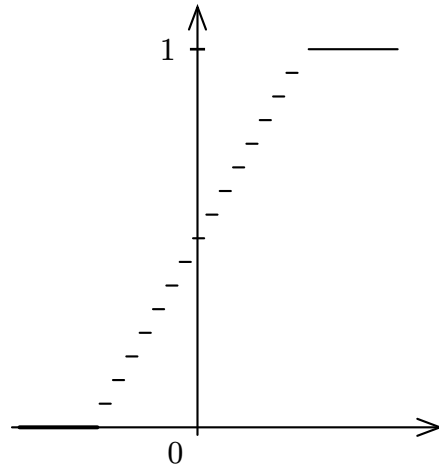
Следующий подход принадлежит трем американским математикам Clauset, Shalizi, Newman, которые, в прочем, опирались на работы двух российских математиков Колмогорова и Смирнова. Так называемая  $KS$ -статистика.

По выборке н.о.р.с.в ( $\xi_1, \dots, \xi_n$ ),  $\xi_i \sim F(x)$ , мы можем построить так называемую Эмпирическую функцию распределения. В одномерном случае алгоритм построения эмпирической функции распределения  $\hat{F}_n(x)$  выглядит просто:

Мы сортируем выборку ( $\xi_1, \dots, \xi_n$ ), по возрастанию, и получаем из нее так называемый вариационный ряд ( $\xi_1^*, \dots, \xi_n^*$ )

Функция  $\hat{F}_n(x) = 0$  для всех  $x < \xi_1^*$ ,  $\hat{F}_n(x) = 1$  для всех  $x > \xi_n^*$ , и в каждой точке  $\xi_j^*$  она совершает скачок на величину  $\frac{1}{n}$ , если существует только одно значение  $\xi_j^*$  (нет равных ей) и скачок на  $\frac{l}{n}$ , если в вариационном ряде встречается  $l$  одинаковых значений  $\xi_j^*$ .

$$\hat{F}_n(x) = \begin{cases} 0, & x < \xi_1^* \\ \frac{l}{n}, & x = \xi_i^* \\ 1, & x > \xi_n^* \end{cases}$$



Определенная функция является функцией распределения по определению. через нее мы проведем истинную функцию, которую мы аппроксимировали такой эмпирической функцией. Чем больше выборка, тем точнее такая аппроксимация будет приближаться к истинной функции. Про эмпирическую функцию распределения было доказано два предельно мощных утверждения.

Первое утверждение носит название теорема Гливенто-Кантелли.

При увеличении выборки до бесконечности, случайная величина  $F_n(x)$  сходится по вероятности к  $F(x)$

$$plim \hat{F}_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} F(x)$$

Второе утверждение носит название теоремы Колмогорова. Если мы рассмотрим статистику  $KS$  вида

$$KS = \sqrt{n} \sup_{-\infty < x < +\infty} |F(x) - \hat{F}_n(x)|$$

То полученная случайная величина будет иметь одно и то же распределение для всех функций  $F(x)$ , так называемое распределение Колмогорова.

На основании этой теоремы Колмогорова и его ученика Смирнова был сформулирован, пожалуй, первый критерий в непараметрической статистике.

Мы выдвигаем нулевую гипотезу, что  $F$  – конкретно заданная функция  $F_0$ :

$$H_0 : F = F_0$$

Тогда, если наша гипотеза верна, то  $F_0$  и  $\hat{F}_n$ , восстановленная по выборке, должны мало отклоняться друг от друга. Причем, мы можем оценить степень этой малости, а именно мы должны сравнить  $KS$  с квантилем распределения Колмогорова.

$$KS \text{ ? } K_{\alpha;n}$$

Где  $\alpha$  – уровень значимости,  $n$  – количество степеней свободы.

Если эта величина действительно мала ( $KS < K_{\alpha;n}$ ), то мы не отклоняем нулевую гипотезу. В противоположном случае мы отклоняем нулевую гипотезу и принимаем альтернативную.

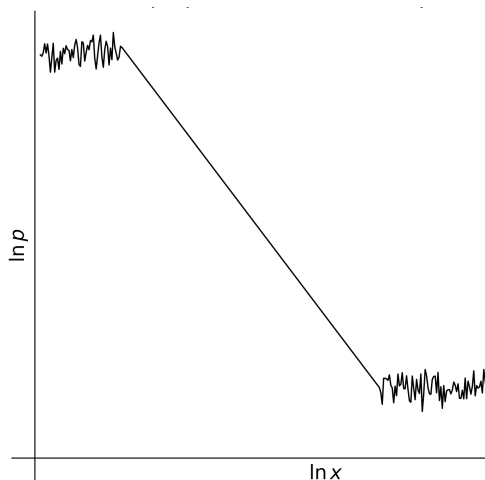
Каковы же недостатки критерия  $KS$ ? Для того, чтобы применять критерий  $KS$  к выборкам в реальных задачах мы должны знать точное значение параметра  $\alpha$ , а для того, чтобы сколько-нибудь адекватно оценить параметр  $\alpha$ , мы должны быть уверены, что выборка, с которой мы имеем дело, порождена степенным распределением. На практике мы получаем логический круг. Но Clauset, Shalizi и Newman придумали способ, как из него выбраться.

Они предложили следующую идею:

1) На практике, степенное распределение в чистом виде встречается редко. Обычно реальные распределения имеют вид

$$P(X) = \begin{cases} ?, & x < x_{\min} \\ C \cdot x^{-\alpha}, & x_{\min} \leq x \leq x_{\max} \\ ?, & x > x_{\max} \end{cases}$$

В двойном логарифмическом масштабе это выглядит как

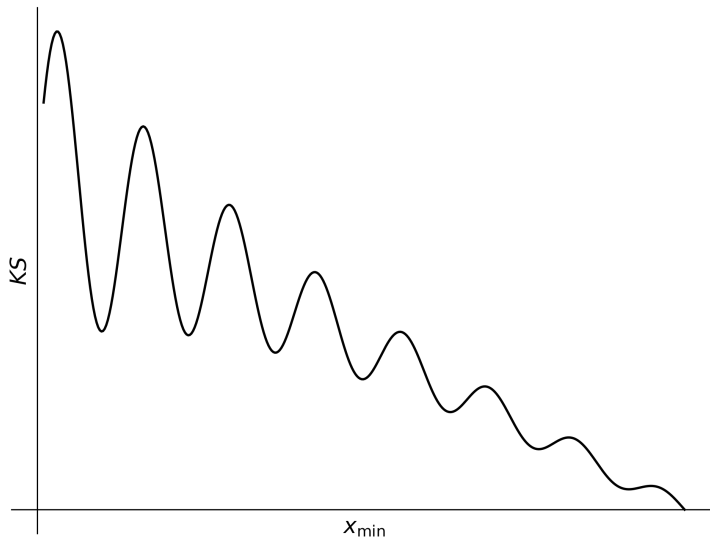


Физически это связано с тем, что сложные системы имеют некие характерные масштабы, для которых и выполняются законы поведения сложных сетей.

Давайте возьмем  $x_{\min}$  в некотором разумном диапазоне значений с некоторым разумным шагом. Для каждого конкретного значения  $x_{\min}$  с помощью метода Хилла, либо любого другого метода параметрической статистики, мы оценим значение  $\alpha$ , удержав в вариационном ряде только те значения, которые больше текущего  $x_{\min}$ . Получив оценку для  $\alpha$ , мы тем самым в точности специфицируем функцию  $F_0$  из критерия Колмогорова Смирнова.

$$F_0 = C \cdot X^{-\hat{\alpha}_{\text{Hill}}}$$

Тогда мы можем для такой функции вычислить значение  $KS$  статистики, для функции от  $\hat{\alpha}$  и в конечном случае от  $x_{\min}$ . Нарисуем график такой зависимости:



Он будет убывающим по очевидной причине — чем меньше у нас выборка, тем точнее мы можем приблизить нашу функцию данным распределением. Он будет убывающим не монотонно, тогда в качестве значения  $x_{\min}$  выбирается значение, при котором функция  $KS(x_{\min})$  достигает своего первого локального минимума. Это некая общая идея, иногда выбирается не первый локальный минимум, а второй или третий, что обычно связано с той ситуацией, что первый локальный минимум является некоторой флуктуацией на убывающем участке такой зависимости.

Тем самым мы получаем оптимальные в некотором смысле оценки  $\hat{x}_{\min}$ ,  $\hat{\alpha}$ .

К сожалению, этого оказалось недостаточно для проведения goodness-of-fit теста для степенного распределения.

Замечание: для  $x_{\max}$  процедура аналогичная, но мы двигаемся справа налево. Однако, обычно  $x_{\max}$  мало влияет на результат, а вот  $x_{\min}$  может быть критичен.

Clauset, Shalizi и Newman предложили решение данной проблемы проверки на степенность. Они предложили на ряду с исходной выборкой рассмотреть еще значительное число синтетических выборок, а именно синтетических выборок, порожденных законом распределения:

$$C \cdot X^{-\hat{\alpha}}, x > \hat{x}_{\min}$$

с теми оценками, которые мы получили движением по графику  $KS$  от  $x_{\min}$ .

Мы берем некоторое степенное распределение, и порождаем выборки. У нас есть много выборок. Для каждой выборки мы считаем  $KS$ , в том числе для исходной (обрезав  $x_{\min}$ ).



В подавляющем большинстве случаев, значение  $KS$  для нашей выборки будет больше, чем для синтетических выборок, которые мы сделали таким образом, чтобы они были максимально близки к нашему реальному распределению.

$KS$  статистика показывает, насколько истинное распределение близко к нашей эмпирической функции распределения.

Если исходная выборка не является степенной, например на самом деле она является нормальной, то  $KS$  статистика для будет иметь гигантское значение, намного большее, чем значение  $KS$  статистики для синтетических выборок, так как мы будем пытаться сравнивать что-то восстановленное по нормальному распределению с истинно степенным распределением.

Мы замерим процент случаев  $p$ , для которых:

$$KS_0 < \min_j KS_j$$

где  $KS_0$  –  $KS$  статистика для нашей выборки,  $KS_j$  – для синтетических. Обычно берут порядка тысячи ( $j < 1000$ ).

Если верна нулевая гипотеза о том, что  $F$  – степенное распределение, что за нашей наблюдаемой выборкой стоит степенное распределение, то  $p > 10\%$ .

Этот полуэмпирический критерий служит способом проверки выборки на степенность. Если  $p < 10\%$ , то есть,  $p$  близко к нулю, то мы имеем дело не со степенным распределением.

В рамках одного метода первое достоинство – мы умудряемся и оценить параметр распределения, и ответить на вопрос, действительно ли распределение является степенным. Второе достоинство – метод работает. Недостатки метода: нет теоретического обоснования границы в 10%, все остальное теоретически обоснованно.

Второй недостаток: время-емкий процесс.

## Лекция 5. Метод Прюснера, Mind-Brain problem.

Метод Прюснера (Pruessner) (self-organized criticality) заключается в том, что при специально выбранных координатах различные выборки, порожденные одним и тем же распределением, дают один и тот же вид распределения. Графически на экране монитора эти зависимости совпадают друг с другом, и мы получаем явление, которое в статистике называется Collapse данных. Соответственно, этот метод выходит далеко за пределы анализа степенных распределений, но Прюснер рассматривал конкретно Collapse данных степенных распределений.

Более того, Прюснер работал с распределениями вида

$$P(x) = \begin{cases} \dots, & x < x_{\min} \\ C \cdot X^{-\alpha} g(x/x_c), & x \geq x_{\min} \end{cases}$$

где  $C$  — константа нормализации,  $x_{\min}$  и  $\alpha$  — нижнее отсечение и параметр степенного распределения,  $x_c$  — характерный размер элементов выборки (максимальное значение элемента в выборке),  $g(x/x_c)$  — функция горба (hunch) и присутствует в большинстве реальных степенных распределений. Если вы возьмете реально степенное распределение и запишите его в двойном логарифмическом масштабе, вы получите что-то вроде:



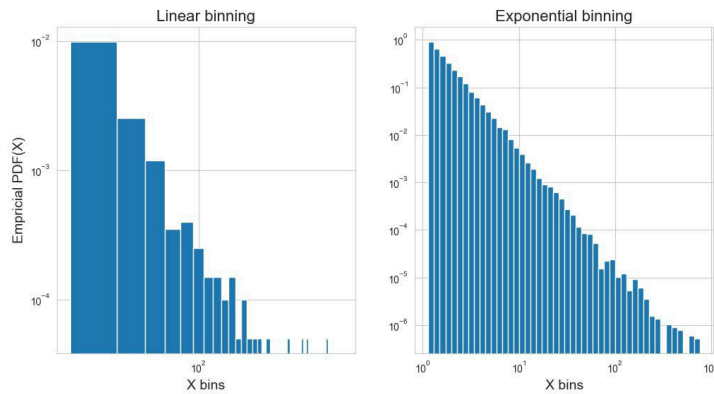
Мы получаем характерный горб, математически его существование вызвано наличием функции  $g(x/x_c)$ , а физически его существование связано с тем, что степенное распределение все-таки предполагает, что у нас бесконечность возможных значений, и невероятные события все-таки существуют. Так как выборка конечно, мы этот бесконечный интервал ужимаем до  $x_{\min}, x_{\max}$ .

Метод Прюснера лучше прошлых методов, так как может работать с горбами.

Метод Прюснера базируется на двух китах:

1-ый кит) Экспоненциальный биннинг - когда мы говорим о биннинге распределений данных, мы привыкли к равномерному биннингу, все бины имеют одинаковую длину. Для степенных распределений это не самая лучшая идея, для них лучше применять бины не одинаковой длины, а именно бины, длина которых растет экспоненциально с увеличением значения  $X$ .

Это достаточно понятно, потому что у степенного распределения большая часть данных будет сконцентрирована в окрестности максимума, но какой-то объем данных, в силу того, что хвост у него тяжелый, будет сконцентрирован дальше.



2 кит) Collapse данных. Допустим мы угадали  $x_{\max}$ ,  $\alpha$  и  $x_c$ , то для различных выборок, порожденных одним и тем же распределением, наши зависимости в координатах  $p' = P(X) \cdot x^{-\alpha}$ ,  $x/x_c = x'$  будут иметь один и тот же вид.

$$p' = C \cdot g(x')$$

Прюснер работал с модельными данными, то есть с выборками, порожденными моделями самоорганизованных критичных систем (самыми сложными из сложных систем). В реальных ситуациях, когда у нас есть всего одна выборка, то, если она достаточно большая, мы берем подвыборки из нее (случайно выбранные, 95%, 90%, 80%), и на этих подвыборках моделируем ситуацию с многими выборками, распределениями. При этом надо ясно понимать, что для каждой из этих выбранных выборок  $x_c$  будет разным, что обеспечивает нам Collapse данных.

Мы берем разные выборки (экспоненциально отбрасываемые), и оцениваем (одним из предыдущих методов) параметр  $\alpha$ . Мы будем обозначать эту оценку  $\alpha'$ , она является очень примерной. Поэтому мы строим наши зависимости в наших координатах  $p', x'$ . Если нулевая гипотеза о том, что мы действительно имеем дело со степенным распределением верна, то мы получаем следующую картинку:



У нас есть участок ниже  $x_{\min}$  с шумом, у каждой выборки он свой, у нас есть наклонный участок прямой, который отвечает  $C \cdot x^{-\alpha}$ , и у нас есть характерный изгиб, который Плюснер назвал Landmark. В силу того, что выборки у нас разные, мы получаем разные положения всех трех участков (они сдвинуты друг на друга). С другой стороны, поскольку  $\alpha'$  получаена с помощью какой-то грубой оценки, то мы имеем дело с наклонным участком прямой, но то, что этот участок есть, является первый признак того, что распределение, все же, степенное.

Третий шаг: мы должны оценить истинное значение  $\alpha$  и  $x_c$ . Если нам это удастся, то вместо множества графиков, как на предыдущем рисунке, мы получим один график характерного вида, иными словами все графики коллапсируют в один.



В этом графике будет участок меньше  $x_{\min}$ , далее горизонтальный участок прямой, указывающий на то, что распределение является степенным, и характерный landmark, отвечающий функции горба  $g$ . Для осуществления коллапса, перехода от

верхнему графику к нижнему, нужно совершить две операции: повернуть график таким образом, чтобы график стал горизонтальным, тем самым получая истинный  $\alpha$ , и выбрать характерный масштаб таким образом, чтобы все горбы совпали друг с другом (они действительно совпадут).

Это можно делать вручную, но Прюснер рекомендует использовать МНК, где в качестве данных выступают положения максимумов горбов и значения в этих максимумах.

Достоинства метода:

Метод работает с реалистичными степенными распределениями, включающими функцию  $g$ .

Метод позволяет оценить не просто параметр такого степенного распределения  $(x_{\min}, \alpha, x_c)$ , но и проверить нулевую гипотезу о том, что распределение действительно является степенным. Появление этого горизонтального участка прямой является критерием проверки.

Метод позволяет провести goodness-of-fit test, что дорогого стоит.

Недостатки:

Поскольку он базируется на разных подвыборках, он требует весьма больших выборок, что не всегда возможно в реальных задачах.

Замечание: теория работы со степенными распределениями является развивающейся областью статистики, и в общем-то задача проверки распределения на степенность является открытой задачей. При практическом использовании целесообразно использовать несколько методов проверки распределения на степенность и делать выводы о степенности, если все три метода дадут положительный ответ с более или менее одинаковыми значениями  $x_{\min}, x_{\max}, \alpha$ .

Конетком и Когнитом – это понятия, введенные в теорию сильного интеллекта академиком Константином Анохиным.

Конетком – совокупность нейронов головного мозга человека вместе со совокупностью их аксонно дендридных связей, носят название конеткома (не трудно догадаться, что это некая сложная сеть со всеми особенностями, присущими сложным сетям, с которыми мы уже знакомы)

*Аксонно дендридные связи – каждый нейрон человека состоит из тела (сомы) и длинного хвоста (аксона), который ведет к другим нейронам. сигналы в головном мозге передаются от одного нейрона к другому через такие аксоно дендритные связи. между ними есть синаптическая щель, которая заполнена нейромедиаторами, сила связи между двумя нейронами определяется концентрацией нейромедиаторов в этой щели. Радость – повышение нейромедиаторов в щелях.*

*Реальное обучение в реальном головном мозге это не изменение концентрации нейромедиаторов, это изменение самой структуры. Все эмоции – отмирание нейронов и построение новых связей.*

Когнитом – мы можем в том или ином смысле исследовать конетком, но внутреннему наблюдению нам доступны только ментальные состояния человека. Эти состояния также образуют сложную сеть, которая носит название когнитома, и уже принадлежит области психического (не материального).

Здесь мы сталкиваемся с вечной проблемой нейро-физиологии, которая носит название Mind-Brain problem. Проблема заключается в том, что взаимодействие вполне реальных вещей не вполне понятным нам образом порождает психические явления, то есть явления, относящиеся к сфере духовного.

Скажем одно, гипотеза Анохина заключается в том, что когнитом представляет собой совокупность когитов, то есть, некоторых временно возникающих совокупностей нейронов головного мозга. Ансамблей нейронов. С математической точки зрения это приводит к понятию сложной гипер-сети, то есть, сложной сети (графа) вершинами которой являются другие сложные сети. ее верхний уровень – когнитом (ментальные состояния), ее самый нижний уровень – конетком (просто связи между нейронами), но есть промежуточные уровни, которых от 1 до 4, точно неизвестно.

В целом, идея конеткома когнитома приводит нас к другому нейро-физиологическому вопросу, вопросу пространственной локализации. Существуют две противоположных точки зрения. Согласно первой точки зрения, высшие

когнитивные функции человека локализованы в конкретных участках головного мозга (например, зрительная кора, отвечающая за распознавание образов, зоны, отвечающие за лексику и грамматику)

Вторая позиция – мозг это единое целое, все связано со всем, но в этом едином целом возникают объекты, которые никак геометрически не связаны с зонами, то есть, расположены в разных местах.

В целом, при математическом описании геометрии в сложных системах, и при ответе на майнд-брейн-проблем, мы можем использовать следующие методы: сложные сети как таковые, при этом обычно применяются Community-detection алгоритмы, второй подход: гиперсети (гиперграфы), третий подход: так называемые симплициальные комплексы – базовое понятие топологии, но в том варианте, в котором оно нам нужно, нам его понять достаточно легко. Мы знаем, что такое граф –  $G(V, E)$ , пусть кроме ребер мы стали рассматривать вершины более высокого уровня, например грани, то есть мы начинаем рассматривать структуру, которая представляет собой  $E \times E \times E$ , это называется симплициальный комплекс.

Последний подход: Графоны – континуальное обобщение графов.

К критической самоорганизованной системе относится естественный язык и человеческий мозг, соответственно сильный искусственный интеллект тоже будет таковой. К самоорганизованной критической системе относятся системы, которые удовлетворяют трем следующим требованиям:

- 1) Они состоят из гигантского числа взаимодействующих элементов, причем правила взаимодействия между этими элементами сравнительно простые.
- 2) В этих системах должны возникать так называемые лавины, когда активация одного элемента влечет активацию второго элемента, второго влечет активацию третьего и так далее. Лавины захватывают существенную часть системы, сопоставимую с ее размерами, или даже систему целиком.
- 3) Размеры лавин подчиняются степенным законам распределениям.

Если это так, то система является самоорганизованной критичной системой. Что же касается языков, то здесь элементарными элементами называются либо сами люди, либо семы – некий элементарный элемент когнитивного пространства.

Лавина – любой текст, произнесенный или сказанный представляет собой лавину в языке.

## Лекция 6. Сложность

Самый важный тег для нас – сложность. Если мы говорим о сильном искусственном интеллекте, то мы должны говорить о сложности.

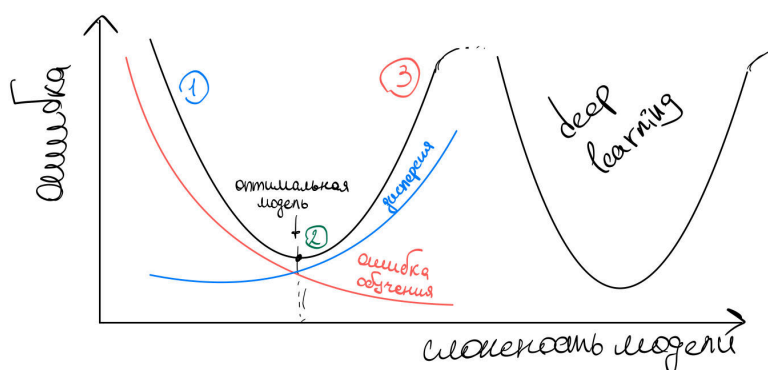
Понятие сложности в математике может определяться по-разному.

Существует три центральных подхода:

- 1) Сложно то, что сложно сгенерировать (Колмогоровская сложность). Если для данного массива данных мы должны построить такую машину Тьюринга, что (какая-то цель) – определение сложности. Практически слабо применимо.
- 2) Сложно то, что сложно предсказать. (Предсказательная сложность). Базовая идея, что если мы не можем предсказать поведение системы, то она сложна.
- 3) Сложно то, что сложно выучить. (Размерность Вафника-Червоненкиса,  $VC$ ).

Эти все рассуждения о сложности не являются чисто теоретически. Золотое правило интеллекта: сложность обрабатываемых данных должна равняться сложности системы, которая их обрабатывает. Для того, чтобы оно работало, необходимо хоть как-то определить сложность.

Когда речь идет об обычных нейронных сетях, мы видим следующую картину:



Если вы увеличиваете сложность, то до какого-то момента ошибка обобщения падает (ошибка обобщения – ошибка на тестовой выборке, ошибка обучения – ошибка на тренировочной выборке), есть некий оптимум сложности, который наилучшим образом соответствует данным, с которыми мы работаем. Если мы продолжаем увеличивать сложность, мы получаем возрастающий участок. Второй кусочек связан с революцией в машинном обучении в связи с появлением глубокого обучения. Но с чем это связано теоретически пока никто не понимает. Возможно это связано с теорией самоорганизации, о которой мы поговорим позже. Как интерпретировать восходящие и нисходящие участки?



Предположим, что у нас есть какая-то истинная функция:



Мы не имеем всей функции, у нас есть выборка, снятая с этой функции. Допустим, сложность системы проще сложности данных, нашей системе просто не хватит ресурсов, чтобы более менее точно соответствовать системе (функция 1). Из-за чего получаем большую ошибку.

Если мы попадаем куда-то в окрестность оптимума, то мы сможем более менее точно пройти по кривой и более менее точно ей соответствовать. (функция 2)

Переобучение – контринтуитивное свойство, в данном случае мы получаем так называемые wild-functions, они достаточно хорошо проходят через каждый элемент выборки, но за счет большого количество степеней свободы мы получаем такой забор (функция 3). Такая функция не имеет никакого отношения к истинной функции, поэтому ошибка обобщения становится гигантской.

Прежде чем переходить к предсказательной сложности (predictive\_complexity), стоит поговорить про информацию и информационную энтропию.

Шэноновская информация. Давайте рассмотрим два вероятностных события:

Событие А: Профессор N вошел в кабинет.

Событие Б: Профессор N убил студента.

Какое событие несет больше информации? Почему?

Вероятность второго события существенно ниже. После этого Шэнон сказал:

$$1) I = f\left(\frac{1}{p}\right)$$

Где  $I$  - информация,  $p$  – вероятность.

$$2) \text{ Пусть есть два независимых события, тогда } I = I_1 + I_2, f\left(\frac{1}{p_1 p_2}\right) = f\left(\frac{1}{p_1}\right) f\left(\frac{1}{p_2}\right)$$

Функция логарифма удовлетворяет такому свойству. С другой стороны можно доказать, что единственная функция, которая удовлетворяет такому свойству – логарифм. Тогда  $I = \ln \frac{1}{p} = -\ln p$

Предположим, что у нас есть система, которая может находиться в  $N$  состояниях. И в этих состояниях она находится с вероятностями  $p_1, \dots, p_n$ . Тогда энтропия по Шэнону есть средняя информация, которую мы знаем о такой системе.

$$H = \langle I \rangle = \sum_{i=1}^N p_i I_i = - \sum_{i=1}^N p_i \ln p_i$$

Что это означает? Свойства:

Предположим, что мы знаем о системе все, тогда мы можем утверждать, что с вероятностью  $p_i = 1$  система находится в определенном состоянии, остальные вероятности равны нулю. Тогда энтропия равна нулю. Значит если мы все знаем о системе, то ее информационная энтропия равна нулю.

В обратной ситуации, когда мы не знаем ничего о системе, то  $p_i$  равновероятны.

$$p_i = \frac{1}{N} \Rightarrow H = \ln N \Rightarrow \ln N = \max(H)$$

Из этих двух свойств мы делаем вывод: информационная энтропия – мера неопределенности системы. Допустим мы получили какую-то информацию, тогда энтропия упадет, и мера полученной информации равна этой разнице.

Как генерировать хаотические ряды?  $X_{n+1} = 1 - \lambda X_n^2$  – логистическая зависимость. Это мы обсуждать не будем, просто пример ряда, который генерирует информацию с каждой итерацией. И за небольшой период времени он сгенерирует тонну информации, хотя по сути, никакой смысловой нагрузки она не имеет. В этом заключается одна из проблем шэноновской энтропии.

Введенная таким образом Шэновская энтропия является аддитивной в силу выполнения свойства 2 (про независимые события), более того, можно показать, что она является единственной аддитивной энтропией. Между тем в сложных системах обычно имеют место так называемые не аддитивные энтропии, для которых свойство 2 не выполняется по банальной причине: считается, что не существует двух подлинно информационно изолированных подсистем.

Поэтому в сложных системах целесообразно применять не аддитивные энтропии, то есть энтропии, для которых неверно  $I = I_1 + I_2$

Этих энтропий бывает много, но основные: энтропия Реньи(Renyi)

$$H_q = \frac{1}{1-q} \ln \sum_{i=1}^n p_i^q$$

Энтропия Цависа(Tsalis), энтропия Каниадакиса(Kaniadakis), энтропия Шарма-Митталя и так далее.. Открытая проблема, к какой сложной системе какую не аддитивную энтропию применять.

Общее методическое замечание: Сложные системы делятся на классы универсальности, классы смежности. Сложным системам, принадлежащим одному классу, свойственны некие универсальные свойства.

Предсказательная сложность. Предположим, что у нас идет некоторый поток данных в некоем времени, не обязательно метрологическом, и мы можем выделить в нем некоторый момент времени  $t = 0$  и две части данных: прошлое и будущее. Тогда данные, относящиеся к прошлому мы будем обозначать как  $X_{past}$ , а к будущему  $X_{future}$ , совместную вероятность прошлого обозначим за  $P(X_{past})$ , совместную вероятность будущего за  $P(X_{future})$ , тогда взаимной информацией между будущим и прошлым будет:

$$I(X_{future}, X_{past}) = \langle \log_2 \frac{P(X_{future} | X_{past})}{P(X_{future})} \rangle$$

Где усреднение производится по совместному распределению  $P(X_{future}, X_{past})$ .

Эта величина носит название Дивергенция Кульбаха Лейблера (Kulback Leibler).

Если мы хотим сравнить между собой, например, две матрицы, мы посчитаем какую-нибудь норму или какое-нибудь расстояние. Это наше действие по умолчанию. А если мы хотим сравнить два вероятностных распределения, то действием по умолчанию является сравнение по Дивергенции Кульбаха Лейблера.

По сути мы сравниваем информацию о прошлом (которая позволяет нам говорить о будущем) с  $P(X_{future})$ . То есть, действительно предсказательную сложность.

Вот математическая мера того, насколько нам сложно предсказать будущее по прошлому. Если мы умножим числитель и знаменатель на  $P(X_{past})$ , то получим

$$\begin{aligned} I(X_{future}, X_{past}) &= \langle \log_2 \frac{P(X_{future} | X_{past})}{P(X_{future})} \rangle = \\ &= -\langle \log_2 P(X_{past}) \rangle - \langle \log_2 P(X_{future}) \rangle - [ -\langle \log_2 P(X_{future}, X_{past}) \rangle ] \end{aligned}$$

Пусть  $past = T'$ ,  $future = T$ ; тогда по определению нами рассмотренной энтропии:

$$= H(T') + H(T) - H(T + T')$$

Таким образом мы свели понятие взаимной информации к некоей комбинации информационных энтропий.

Выражение, введенное для совместной информации, введенное таким образом, является симметричным. В этом смысле равносложными являются задачи как предсказания, так и подсказания, когда мы прошлое определяем по будущему.

В формуле  $H$  всегда есть линейная составляющая и еще одна одна величина.

$$H(T) = H_0 \cdot T + \underbrace{H_S(T)}_{o(T)}$$

Первая, линейная, называется экстенсивной энтропией, она связана с течением времени. То есть, любая система подчиняется второму началу термодинамики. В этом смысле энтропия растет всегда, причем растет пропорционально протекающему времени. Это имеет место абсолютно для любой системы. И это в общем то неинтересно.

Вторая – субэкстенсивная энтропия, которая ведет себя как  $o(T)$  и определяет поведение системы, которая отличает ее от всех остальных.

Мы постараемся показать, что разные системы дают нам принципиально различные функции суб-экстенсивной энтропии как функции времени. Тип этой функции и дает нам класс сложности соответствующей системы. Более того, типов этих функций существует не так уж и много. И это дает нам некоторый первый подход к классификации сложных систем. Пока же нам достаточно отметить, что экстенсивные составляющие энтропии сокращаются. Соответственно, совместная информация определяется только суб-экстенсивной составляющей энтропии.

$$I(X_{future}, X_{past}) = H_s(T') + H_s(T) - H_s(T + T')$$

Предположим, что мы знаем о прошлом все, тогда мы можем устремить  $T'$  к бесконечности:

$$\lim_{T' \rightarrow +\infty} I(T | T') = H_s(T) = I_{pred}(T)$$

Тогда мы получим по сути суб-экстенсивную составляющую того, что мы называем будущим. Эта величина и носит название предсказательной сложности.

Нужно обратить внимание на следующий факт: эта величина симметрична относительно обращения прошлого и будущего. Задача предикции и постдикции – одинакова. Можно устремить не  $T'$ , а  $T$ , получится то же самое выражение.

Здесь можно сказать, что, когда мы говорим о такой хорошей, фундаментальной величине, она должна удовлетворять двум, противоречивым требованиям:

- 1) она следует из базовых принципов
- 2) ее нужно уметь измерить экспериментально

Метрика хорошо измеряется.

## Лекция 7. Плоскость Энтропия-Сложность

Классической постановкой является постановка следующего вида:

Мы наблюдаем временной ряд  $y_0, y_1, \dots, y_t, \dots, y_t \in \mathbb{R}^S$  (вообще говоря, дальнейшие рассуждения работают для любого  $s$ , но для простоты мы будем рассматривать случай  $s = 1$ ) и завершаем его наблюдение в момент времени  $t$ . Мы хотим получить прогноз данного временного ряда для момента времени  $t + 1, t + 2, \dots, t + K$ , где  $K$  — некоторая константа, число шагов вперед, на которые мы хотим получить прогноз. Мы хотим получить оценки  $\hat{y}_{t+1}, \hat{y}_{t+2}, \dots, \hat{y}_{t+k}$  неизвестных нам наблюдений  $y_{t+1}, y_{t+2}, \dots, y_{t+k}$  таким образом, чтобы

$$\sum_{j=1}^k \mathbb{E}[y_{t+j} - \hat{y}_{t+j}]^2 \rightarrow \min$$

И абсолютно все методы, от простейшего линейного МНК до сверхсложных алгоритмов прогнозирования на основе кластеризации и нейросетевых моделей, укладываются в эту постановку.

Проблема заключается в том, что все возможные ряды укладываются в две большие категории: регулярные ряды и ряды хаотические. Базовым свойством, отличающим хаотические ряды от регулярных, является наличие горизонта прогнозирования. То есть, числа шагов вперед, на которые мы в принципе в состоянии спрогнозировать ряд любым из возможных и невозможных методов. Горизонт прогнозирования — это физическое свойство наблюдаемой системы.

Для регулярных рядов горизонт прогнозирования равен  $+\infty$ , для хаотических рядов горизонт прогнозирования конечен, его можно посчитать по ряду, например, алгоритмом Розенштейна.

Допустим, у нас есть регулярный ряд, например, зашумленная синусоида, понятно, если нам удалось как-то оценить его амплитуду / фазу, допустим, с помощью того же МНК, то, теоретически, мы можем давать прогноз до бесконечности. (пока система вообще существует)

Однако, регулярные ряды в природе не встречаются. Если мы хотим работать с действительно сложными системами, то мы должны учиться работать именно с хаотическими рядами. А в хаотических рядах мы сразу натываемся на горизонт прогнозирования. Ошибка прогнозирования здесь растет экспоненциально.

Для регулярных и хаотических рядов существуют принципиально различные методы прогнозирования.

Допустим, перед нами есть ряд. По его графику трудно понять, регулярной он или хаотический. Возникает естественный вопрос, а можем ли мы отличить регулярный ряд от хаотического? Это базовый вопрос теории прогнозируемых рядов. Регулярные ряды – простые, хаотические ряды – сложные. Простые системы, обычные системы искусственного интеллекта порождают регулярные ряды, сильный искусственный интеллект порождает хаотические. Это недостаточный, но необходимый признак.

Плоскость Энтропия-Сложность: рассмотрим наблюдаемую часть временного ряда

$$y_0, y_1, \dots, y_t, \dots$$

и разобьем его на отрезки длины  $k$ . В теории их называют z-вектора, а на жаргоне – чанки (chunks).  $k$  – достаточно небольшая величина.

$$z_0 = (y_0, y_1, \dots, y_{k-1})$$

$$z_1 = (y_1, y_2, \dots, y_k)$$

И так далее. Мы предполагаем, что элементы каждого z-вектора строго не равны друг другу, поэтому относительно двух соседних элементов мы можем сказать, что  $y_i$  строго больше / меньше  $y_{i+1}$ ; тогда мы можем ввести понятие канонического расположения наблюдений в z-векторе, например, будем считать, что  $y_i < y_{i+1}$  для всех наблюдений в z-векторе. Мы имеем монотонно возрастающий набор элементов. Мы можем ввести понятие перестановки, которая приводит актуально наблюдаемую последовательность к каноническому виду.

При достаточно большом объеме наблюдаемой части ряда мы можем считать частоту появления перестановки того или иного типа (z-вектора того или иного типа) хорошей мерой, хорошей оценкой его вероятности (ЗБЧ). Тем самым, каждому временному ряду мы можем поставить в соответствие набор вероятностей  $p_1, \dots, p_n$  появления перестановки того или иного типа.

Авторами этого метода (бразильцы Martin, Plastino, Rosso) было предложено, основываясь на этих вероятностях, посчитать две величины, характеризующие исходный временной ряд. Первая величина – это привычная нам энтропия, но нормированная на ее максимальное значение ( $\log m$ ), затем, чтобы нормированная энтропия лежала в пределах от нуля до единицы.

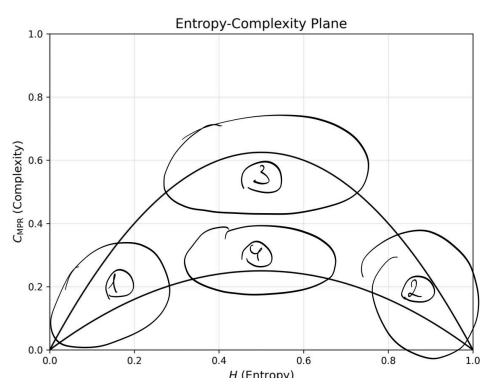
$$0 \leq H \leq 1$$

Одной характеристики оказалось недостаточно. Вторая характеристика носит название сложности, а если быть точным, MPR-сложности (фамилии авторов).

$$C_{\text{MPR}} = Q_0 \cdot H \cdot \|P - P_e\|$$

где  $P_e$  — равномерное распределение, то есть:  $P_e = \{p_j = \frac{1}{N}\}$ ,  $H$  — энтропия,  $Q_0$  — нормализующая константа, которая гарантирует, что  $0 \leq C_{\text{MPR}} \leq 1$ ,  $\|P - P_e\|$  показывает, насколько уклоняется актуальное распределение от распределения равномерного.

Далее мы нашему ряду ставим в соответствие два числа, которые лежат в единичном квадрате.



Если ряд относится к простым детерминированным процессам (допустим, синус), то соответствующая точка попадет в левый нижний угол (область 1) нашего геометрического места точек (точка не может попасть ниже нижней «параболы», выше верхней «параболы»).

Если ряд является чисто случайным процессом, то соответствующая точка (пара энтропии и сложности) попадет в правый нижний угол этой фигуры (область 2).

Если же ряд относится к хаотическим рядам, то он попадет в окрестность вершины верхней «перевернутой параболы» (область 3).

Если речь идет о цветных шумах, то речь идет об оставшейся области (область 4).

*(Если кто-то хочет заниматься hft, то ваша область будет лежать между областями 3 и 4, то есть, хаотический ряд с ярко выраженным цветным шумом)*

*(Интуиция + понимание: первое утверждение верно, так как большинство вероятностей будет зануляться, например на примере синуса, вероятность большинства перестановок будет равна нулю, так как синус подвергается четкому закону и многие перестановки никогда не встретятся. таким образом будет очень маленькая энтропия, которая занулит сложность, так как напрямую содержится в ее формуле.*

*У случайного процесса распределение будет близким к равномерному, тогда норма в сложности будет близка к нулю, при этом будет высокая энтропия, так как чем ближе мы к равномерному, тем больше у нас степень неопределенности.*

*Заметим, что у хаотического ряда энтропия равна примерно одной второй, то есть, не все последовательности возможны. Мы говорим, что это*

детерминированный процесс, но часть последовательностей запрещена, причем, порядка 50%. С другой стороны этот процесс максимально сложный. То есть этот процесс максимально удален от равномерного распределения (смотреть на норму).

Все хаотические ряды – только сингулярные распределения. То есть такие распределения, которые не являются ни дискретными, ни равномерными. И все сложные системы имеют именно сингулярные распределения.)

Рассмотрим классическую задачу регрессионного анализа. Мы имеем две выборки:  $x_1, \dots, x_n$  и  $y_1, \dots, y_n$ , и предполагаем, что выборка  $x$  состоит из детерминированных величин (это не всегда так), а  $y$  – величины случайные, причем связь между  $x$  и  $y$  дается соотношением:

$$y = f(x, \alpha) + \varepsilon$$

Где  $f$  – некоторая, вообще говоря, нелинейная функция,  $\alpha \in \mathbb{R}^S$  – вектор параметров,  $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)$  – вектор случайных составляющих. В таком случае  $y$  действительно случайная величина.

Задача – нужно найти такие значения  $\alpha = \alpha^*$ , что математическое ожидание меры уклонения вектора  $y$  от вектора  $f(x, \alpha)$  было минимальным в той или иной мере. При этом обычно стремятся к тому, чтобы случайные величины, которые являются оценкой  $\alpha$ , были «хорошими» в статистическом смысле. (Несмещенность, состоятельность, эффективность.)

$$\frac{1}{n} \sum \mathbb{E}[y_i - f(x_i, \alpha)]^2 \rightarrow \min$$

Данная идея хороша, только если  $\varepsilon$  хорош в статистическом смысле. Иначе полученный результат будет плохим. Для того, чтобы получать хорошие оценки параметра  $\alpha$  с помощью интуитивно понятных теоретико-вероятностных методов типа МНК или метода максимального правдоподобия, необходимо, чтобы случайные составляющие  $\varepsilon$  удовлетворяли условиям Гаусса-Маркова. Условие заключается в том, чтобы  $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$  были н.о.р.с.в. (iid). Дополнительно к этому условию добавляют условие нормальности, то есть,  $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$



## Лекция 8. Решение ОДУ. Теория бифуркаций.

Обыкновенные дифференциальные уравнения. Естественным продолжением, и более того, причиной появления того, что называется интегрально-дифференциальное исчисление (математический анализ) является необходимость решения задач, которые описываются обыкновенными дифференциальными уравнениями или уравнениями в частных производных.

Формально, обыкновенные дифференциальные уравнения – это уравнения, которые зависят от неизвестной функции и какого-то числа ее производных.

$$F(y(x), y'(x), \dots, y^{(n)}(x)) = 0$$

Решением обыкновенного дифференциального уравнения является  $f(y(x))$

Замечание: по отношению к обыкновенному дифференциальному уравнению мы можем ставить два типа задач:

1) Задача Коши(Cauchy) : предполагает, что все дополнительные условия сосредоточены в одной точке.

$$\begin{cases} y(x_0) = y_0 \\ y'(x_0) = y'_0 \\ \dots \\ y^{(n)}(x_0) = y_0^{(n)} \end{cases}$$

Где  $y_0, y'_0, \dots, y_0^{(n)}$  – это конкретные числа.

2) Краевая задача : дополнительные условия сосредоточены в нескольких точках. (Простейший пример: двухточечная краевая задача)

$$\begin{cases} y(x_0) = y_0 \\ y'(x_0) = y'_0 \\ \dots \\ y^{(k)}(x_0) = y_0^{(k)} \\ y^{(k+1)}(x_1) = y_0^{(k+1)} \\ \dots \\ y^{(n)}(x_1) = y_0^{(n)} \end{cases}$$

Обычно для начальной задачи  $x_0$  совпадает с левым краем области определения функции  $y(x)$ , с его началом. Отсюда название начальная задача. Мы знаем что-то в некий начальный момент времени. И хотим понять, как оно развивалось дальше. Это не является догмой. Формальное определение – условие сосредоточено в одной точке.

В случае краевой задачи  $x_0$  совпадает с левым краем промежутка определения  $y(x)$ , с его началом, а  $x_1$  совпадает с концом, правым краем, отсюда название – краевая задача. Это тоже не является догмой. Кроме того, в краевой задаче может быть больше точек и больше условий, могут быть более сложные условия.

Пример:

Простейшим и очевидным демографическим законом является то, что число рожденных (в некоторый промежуток) детей пропорционально числу живущих в данной стране людей. Столь же очевидно, что число умерших людей будет пропорционально той же величине, числу живущих в данной стране людей.

Давайте обозначим через  $y(t)$  число людей, популяцию, в момент времени  $t$ . И попытаемся вывести демографическое уравнение, то есть, получить ответ на вопрос, как будет меняться количество людей с течением времени.

За некий период времени  $\Delta t$  изменение количества людей  $\Delta y$  равно:

$$\Delta y = y(t + \Delta t) - y(t) = [K_p \cdot y(t) - K_y \cdot y(t)] \Delta t$$

$$\frac{y(t + \Delta t) - y(t)}{\Delta t} = (K_p - K_y)y(t)$$

Пусть  $K = K_p - K_y$ . Применим к обоим частям операцию предельного перехода:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{y(t + \Delta t) - y(t)}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} K y(t)$$

$$\dot{y}(t) = K y(t)$$

$K_p$  – коэффициент рождаемости,  $K_y$  – коэффициент смертности,  $\dot{y}$  – производная по времени. Получили обыкновенное дифференциальное уравнение.

Кроме того, к этому ОДУ мы можем сформулировать задачу Коши:

$$y(t_0) = y_0$$

В некий момент  $t_0$  число людей в стране –  $y_0$ .

Одними и теми же уравнениями мы можем описывать принципиально разные процессы. Пусть  $y(t)$  – не население страны, а масса радиоактивного вещества. Тогда можем применить теорему полураспада – объем распадающегося радиоактивного вещества пропорционален объему радиоактивного вещества. Получаем то же самое уравнение без  $K_p$ , так как ничего не пребывает, только убывает.

Решим полученное уравнение коэффициента рождаемости:

$$\frac{dy}{dt} = Ky \Rightarrow \frac{dy}{y} = K dt$$

Применим к обеим частям равенства операцию интегрирования.

$$\int \frac{dy}{y} = \int K dt$$

$$\ln|y(t)| + C_1 = Kt + C_2$$

Мы имеем две неопределенные константы, можем сказать, что  $C = C_2 - C_1$ .

$C' = e^C$ . Пропотенцируем данное выражение:

$$y(t) = e^{Kt} \cdot C'$$

$$y(0) = C' = y_0$$

$$y(t) = y_0 \cdot e^{Kt}$$

Получили решение задачи Коши для данной системы.

Давайте предположим, что  $K_y > K_p$ . Это означает, что  $(K_p - K_y) < 0$ . Тогда если устремим  $t$  к бесконечности, то  $y(t) \rightarrow 0$ . Если демографический коэффициент меньше нуля, то население страны вымрет. Экспонента – очень быстро убывающая функция. Так что население вымрет очень быстро.

С другой стороны, если  $K_y < K_p$ , то при  $t \rightarrow \infty$   $y(t) \rightarrow \infty$ . Эта скорость даст очень быстрый прирост населения.

В силу замкнутости, например, земного шара, к бесконечности такая величина стремиться не может. Это не значит, что решение неверное, но это лишь часть правды. Допустим, мы не знаем точную функцию, по которой меняется население (или другая величина).

$$\Delta y = y(t + \Delta t) - y(t) = \underbrace{f(y(t))}_{\text{неизвестная функция}} \Delta t$$

Разложим по Тейлору:

$$y(t + \Delta t) - y(t) = f(y(t))\Delta t = \left[ \underbrace{f(0)}_0 + \underbrace{f'(0)}_k y(t) + \underbrace{\frac{f''(0)}{2}}_{-k_2} \left( y(t) - \underbrace{y(0)}_0 \right)^2 \right] \Delta t$$

Что касается второй производной, было эмперически доказано, что эта величина отрицательна. Тогда применим предельный переход:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{y(t + \Delta t) - y(t)}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} [ky - k_2 y^2]$$

$$\begin{cases} \dot{y}(t) = ky(t) - k_2 y^2 \\ y(0) = y_0 \end{cases}$$

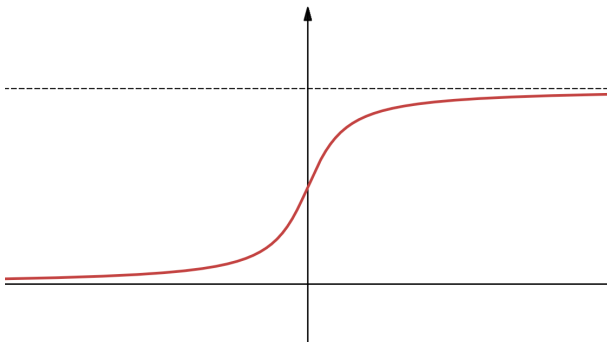
$$\frac{dy}{ky - k_2 y^2} = dt$$

Применяем интегрирование:

$$\int \frac{dy}{ky - k_2 y^2} = \int dt = t + C$$

$$\int \frac{dy}{y(k - k_2 y)} = \int \left[ \frac{A}{y} + \frac{B}{k - k_2 y} \right] dy$$

Получим арктангенс, который даст нам следующую картину:



Что еще важно: у ОДУ кроме обычных решений существуют еще так называемые «особые решения», которые, несмотря на их тривиальность, дают очень много для понимания поведения реальной системы, которая описывается ОДУ. Одним из типов особых решений для уравнения вида:

$$\dot{y} = f(y)$$

Это решение вида (точечное решение):

$$y(t) = y_0 = \text{const}, y_0 : f(y) = 0$$

Константа  $y_0$  должна согласовываться с начальным условием. Почему  $y(t)$  равно константе будет решением? Подставим такое решение в наше дифференциальное уравнение, тогда левая часть обратится в ноль, так как производная константы равна нулю, а правая часть обнулится так как мы искали  $y_0$  таким образом, чтобы  $f(y) = 0$ . Начальные условия так же выполнены.

Какие же типы особых решений есть у наших демографических уравнений?

$$\dot{y} = ky = 0 \Rightarrow y(t) \equiv 0$$

Если людей не было, то они и не появятся.

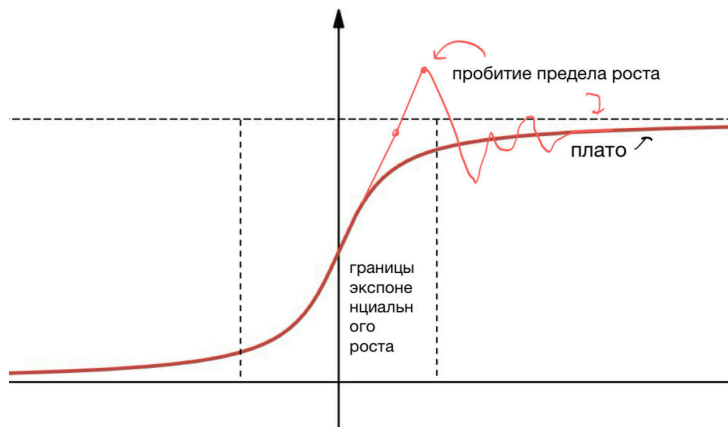
Тогда кроме нашего арктангенса получаем еще два решения, на самом деле это верхняя и нижняя граница нашего арктангенса. Если мы рассмотрим другие

решения при  $t \rightarrow \infty$ , мы заметим, что при  $K < 0$  все наши решения будут стремиться к тривиальному решению, то есть к нулю. А если  $K > 0$ , они будут уходить от этого решения.

Какие особые решения есть у более сложного уравнения, полученного через Тейлора?

$$\dot{y}(t) = ky(t) - k_2 y^2 = 0 \Rightarrow y \equiv 0; y(t) \equiv \frac{k}{k_2}$$

Если людей мало, то рост населения экспоненциальный. Та простая модель была верной, но только на определенном промежутке.



Когда число людей превышает определенный порог, то число людей выходит на определенное плато (а именно  $\frac{k}{k_2}$  – емкость системы, в данном случае система на определенной стадии развития может прокормить определенное количество людей). Это называется порог системы. Переход от экспоненциального роста к плато называется предельным переходом. Предел роста. У каждой системы есть такой предел.

Когда мы пробиваем предел, система какими-то жесткими механизмами возвращают состояние системы на наше плато. Психологически сложно осознать, что система достигла своего предела и нужно что-то менять.

Замечание: ОДУ делятся на линейные и нелинейные. В линейных правая часть зависит от неизвестной функции и ее производных линейно, во втором случае она зависит нелинейно. Это порождает два лагеря математиков.

Простота линейных в том, что они решаются простой формулой. Для нелинейных таковой нет. Бельгийский ученый (Илья Пригожин) сформулировал гипотезу: мир нелинеен, темпорален, случаен. Линейные уравнения – лишь приближение к нелинейным в некоторой узкой области параметров.

## Лекция 9. Качественная теория ОДУ. Нейродифференциальные уравнения

Нужно идею дифференциальных уравнений развить до тех идей, которые будут использоваться в сильном искусственном интеллекте.

Качественные и количественные теории ОДУ.

Количественная теория ОДУ предполагает, что базовым объектом исследования является само по себе ОДУ, и представляет собой некую сводку правил аналитического решения такого рода уравнения. Классический подход того, как излагать ОДУ. Этот подход сталкивается с двумя возражениями, когда речь идет о реальных, практических задачах, связанных с ОДУ.

Первое возражение: Подавляющее число ОДУ не имеет аналитического решения. (не мы не можем его найти, а его просто нет, доказан факт его отсутствия) И в этом случае мы выходим за рамки классических ОДУ и приходим в другую математическую дисциплину: численные методы или вычислительная математика. Это рассказ о том, как решать ОДУ с помощью компьютера. Термин носит название численно интегрировать ОДУ.

*Какая базовая проблема ОДУ на примере примера с прошлой лекции? При решении у нас возник коэффициент рождаемости, что, на самом деле, сложно вычисляемая вещь. Коэффициент рождаемости еще звучит реально, но когда мы уходим за рамки простых физических процессов, мы обнаруживаем, что эти коэффициенты определяются нестрого. Когда речь идет о химических-физических задачах, предметы подвержены каким-то простым законам и нам легко их описать, а если система сложная (а сильный интеллект относится к сложной системе), то законов тоже много и они сложны.*

В математической экологии есть классическое дифференциальное уравнение хищник-жертва (модель Лотки-Вольтерры)

Если  $x(t)$ ,  $y(t)$  это количество жертв и хищников, то выполняется следующее

$$\dot{x}(t) = \alpha x(t) - \gamma x(t)y(t)$$

$$\dot{y}(t) = \beta y(t) + \gamma x(t)y(t)$$

Так же в математической экологии есть десятки версий таких уравнений для разных фаун, однако они все улавливают фундаментальные, качественные принципы поведения системы.

Отсюда следует следующее:

При исследовании реальных процессов, описываемых ОДУ, нам важен не вид конкретного дифференциального уравнения, а качественные свойства, которые эту модель описывают. Глобально эта идея носит название мягкого моделирования. А применительно к ОДУ, она дает нам качественную теорию ОДУ. Качественная теория работает с качественными свойствами и базовым ее объектом являются так называемые потоки ОДУ, о которых мы поговорим позже.

Если мы хотим работать со сложными системами, то мы должны работать, во-первых, с численными методами, во-вторых, с качественной теорией ОДУ. Это наша базовая интенция.

*Качественная теория: не останавливаемся на решении одного уравнения, нам интересно изучать свойства набора уравнений*

Численные методы решения ОДУ. В подавляющем большинстве аналитических решений не существует и нужно их искать численно. Здесь возможны два варианта: Задача Коши :

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y) : y \in \mathbb{R}^1 \\ y(0) = y_0 \end{cases}$$

И краевая задача. Рассмотрим, как решать задачу Коши в одномерном случае, но в общем случае алгоритм такой же, просто более сложный, матричный.

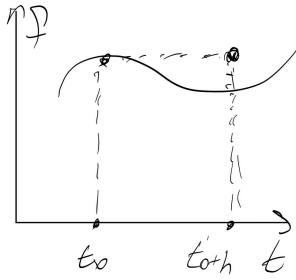
Разобьем область определения  $y \in [0, x_{\max}]$  на маленькие кусочки длины  $h$ . Стоит подчеркнуть, что  $h$  являются малыми, но не бесконечно малыми, около  $10^{-2}, 10^{-3}$  в сравнении с  $x_{\max}$ . Рассмотрим первый из таких промежутков, лежащий от 0 до  $h$ . Перепишем наш диффур в виде  $dy = f(x, y)dx$ . Сначала применим оператор интегрирования  $\int_0^h$ . Применим к нашему диффуру формулу Ньютона-Лейбница на этом участке.

$$y(h) - y(0) = \int_0^h f(x, y)dx$$

$$y(h) = y(0) + \int_0^h f(x, y)dx$$

Если нам удастся оценить этот интеграл, то мы сможем найти  $y(h)$ .

Самый простейший метод оценки – посчитать площадь трапеции под функцией.



Давайте рассмотрим площадь прямоугольника, она будет примерно равна

$$h \cdot f(t_0, y(t_0))$$

Это выражение мы можем вычислить, значит мы знаем  $y(t_0)$ . Давайте рассмотрим следующий кусочек  $[t_0, t_0+h]$ . Такой же логикой мы можем найти  $y(t_0+h)$ , зная  $y(t_0)$ . В результате последовательного применения численного интегрирования мы получаем последовательность значений исходной функции, удовлетворяющей граничным условиям и дифференциальному уравнению. Находим решение для этой функции в конечном множестве точек. Так как  $h$  по сути параметр, мы можем сделать эти значения сколь угодно частыми. Если мы нарисуем график, то увидим, что аналитическое и численное решения совпадают. Таким образом, нет большого смысла искать аналитическое решение в реальных задачах.

Следует иметь в виду, что любой численный метод обладает погрешностью, вносимой на каждом шаге численного интегрирования. Чем дальше мы движемся, тем большую погрешность мы внесли в решение. Для рассмотренного метода Эйлера погрешность на каждом шаге составляет  $O(h)$ . Значит в самом неудачном случае двигаясь по промежутку мы можем внести погрешность сравнимую с значением функции.

К счастью, существуют гораздо более эффективные методы численного интегрирования. Самым базовым является метод Рунге-Кутты (4-го порядка). Он тоже основывается на достаточно логичных принципах, мы функцию разности между истинной и аппроксимированной функцией раскладываем в функцию Тейлора.

Погрешность, которую дает этот метод на каждом шаге:  $O(h^s)$ , где  $s$  — взятый порядок.



Отступление. Нейродифференциальные уравнения.

Какое-то время назад в нейронных сетях произошла революция, когда все перешли с малых моделей на глубокое обучение. Следующей же революция будет связана с нейродифференциальными уравнениями.

У нас некая нейронная сеть, например Resnet,  $x_{n+1} \in \mathbb{R}^s = x_n + f(x_n)$  – состояние следующего слоя. Состояние следующего слоя – функция активации от текущего слоя. В теории нейродифференциальных уравнений мы говорим: давайте считать, что процесс протекания информации от входа в нейронную сеть к выходу – процесс, разворачивающийся в дискретном времени с шагом единица.

Для первого слоя мы находимся в  $n = 0, n = 1, \dots, n = N, \Delta t = 1$

Это означает, что у нас есть две величины: одна  $N$  – число слоев, а вторая,  $T$  – (физическое) время, которое протекло от момента подачи информации до момента выхода.

До этого мы их не различали, потому что считали, что  $T = N \cdot \underbrace{\Delta t}_{=1}$ . Дальнейшая логика изложения: что такое переход от неглубокого обучения к глубокому? Ранее  $N$  было небольшим, позже мы обсудим почему, но произошла некая революция, модели глубокого обучения, где мы сказали, что  $N$  – весьма большая величина. Нейродиффурики сказали: давайте доведем процесс до конца. Давайте не считать время  $T$  фиксированным, а  $N$  устремим к бесконечности.  $T$  – константа,  $N \rightarrow \infty$ , следовательно,  $\Delta t \rightarrow 0$ . Перепишем состояния слоев:

$$\frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} = f(x(t))$$

Давайте применим оператор предельного перехода к обоим частям равенства:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} = f(x(t))$$

Получаем ОДУ:  $\frac{dx}{dt} = f(x(t))$ . Получаем обычную задачу Коши, остается только добавить, что  $x(0) = x_0$ . Следуя традиции классического машинного обучения мы смотрим не на истинный объект (нейродиффурик), а какое-то приближение:

$$x_{n+1} = x_n + f(x_n)$$

Если внимательно посмотреть на формулу Эйлера, то мы обнаружим, что на самом деле мы для исследования истинного объекта используем старый метод Эйлера. Сейчас идет стремительный переход к нейродифференциальным уравнениям, мы поговорим о них далее.

То, что мы сейчас расписали – это лишь то, что называется прямой ход нейронной сети. Мы написали уравнение, которое описывает изменение состояния. Здесь у нас слоев бесконечно количество, но сути это не меняет. Понятно, что здесь мы не рассмотрели главного: в нашей нейронной сети нет весов. При рассмотрении нейродифференциальных уравнений мы, конечно же, должны рассматривать и вектор-функцию весов  $w(t)$ , где  $w(t)$  есть некий аналог матрицы (тензора) весов нейронной сети, который получается из него тем же предельным переходом  $\Delta t \rightarrow 0$ . Тогда мы имеем, что наш диффур зависит не только от состояния  $x(t)$ , но и от  $w(t)$ , которая и подлежит определению.

$$\frac{dx}{dt} = f(x(t), w(t))$$

Мы будем определять ее следующим образом:

У нас есть некая функция ошибки (потери), которая характеризует состояние сети на выходном слое, или в наших новых терминах состояние сети в последний момент времени  $T$  и некие указания учителя  $x^*$ , причем эту функцию мы стремимся минимизировать.

$$L(x(T), x^*) \rightarrow \min$$

Например квадратичная функция ошибки:

$$L = \frac{1}{2}[x(T) - x^*]^2$$

$$dx = f(x(t), w(t))dt$$

$$\int_0^T dx = \int_0^T f(x(t), w(t))dt$$

$$x(T) = \underbrace{x(0)}_{=x_0} + \int_0^T f(x(t), w(t))dt \Rightarrow$$

$$\Rightarrow L = \frac{1}{2} \left[ x_0 + \int_0^T f(x(t), w(t))dt - x^* \right]^2 \rightarrow \min$$

$w(t)$  – наша степень свободы. Наша задача найти такое  $w(t)$ , чтобы наша функция ошибки была минимальной.

Хотим найти минимум этого функционала при ограничениях:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = f(x(t), w(t)) \\ x(0) = x_0 \end{cases}$$

Это делается вариационными вычислениями, тема следующей лекции.

## Лекция 10. Вариационное исчисление.

В прошлый раз мы показали, что всякая нейросетевая модель представляет собой дискретный вариант нейродифференциального уравнения. Точнее, ее прямой ход – это нейродифференциальное уравнение, ее обратный ход, отыскание функции весов сети, суть есть задача вариационного исчисления (оптимального управления – когда вариация и сама функция могут быть разрывны в конечном числе точек). То, в каком виде у вас сформулирована задача, представляет собой ситуацию, когда мы подаем на вход сети ровно одно наблюдение ( $x_0$ ), что является неестественной ситуацией. Нормальная ситуация заключается в том, что мы подаем на вход некоторую выборку ( $\xi_1, \dots, \xi_n$ ), полученные из некоторого распределения  $P_0(x)$ , а получаем некоторую выборку ( $\eta_1, \dots, \eta_n$ ), полученной из распределения  $P_1(x)$ .

В отличие от теории вероятности в статистике рассматриваются не только теоретические функции распределения, но и их эмперические аналоги.

Собственно говоря, вся статистика заключается в том, что мы пытаемся построить некий аналог теоретической величины (рассмотренной в теории вероятности), такой, что этот аналог восстановим по выборке (является функцией выборки) и он в заданном смысле близок к неизвестной теоретической величине. Он хорош в статистическом смысле.

Можем ли мы восстановить распределение выборки? Отсортируем выборку  $\xi_1, \dots, \xi_n$  по возрастанию и получим вариационный ряд  $\xi_1^*, \dots, \xi_n^*$ . Построим следующую функцию:

$$\hat{F}_n(x) = \begin{cases} 0, & x < \xi_1^* \\ \frac{l}{n}, & x = \xi_i^* \\ 1, & x > \xi_n^* \end{cases}$$

Подробнее см. лекцию 4, где мы строили эмперическую функцию таким же образом. (+ рисунок)

Такая функция является хорошим приближением к истинной функции распределения  $F(x)$ . Более того, для этой функции доказаны весьма сильные математические свойства:

1)  $\text{plim}_{n \rightarrow \infty} \hat{F}_n \rightarrow F(x)$  – Теорема Гливенто-Кантелли. Это означает, что эмперическая функция распределения является тем более сильным приближением к истинной функции, чем больше размер выборки  $N$ .

Соответственно, мы можем утверждать, что если мы имеем дело с большой выборкой, то мы можем рассматривать восстановленную по выборке функцию

распределения как хороший аналог, замену истинной функции распределения, которую мы не знаем.

Более того, для эмперической функции распределения Колмогоровым было доказано еще более сильное утверждение. Если мы рассмотрим статистику  $KS$  вида

$$KS = \sqrt{n} \sup_{-\infty < x < +\infty} |F(x) - \hat{F}_n(x)|$$

То полученная случайная величина будет иметь одно и то же распределение для всех функций  $F(x)$ , так называемое распределение Колмогорова. Оно даже выразимо в виде элементарных функций.

Это означает, что мы можем угадывать истинную функцию распределения.

Пусть у нас есть некое нейродифференциальное уравнение:

$$\dot{x} = f(x(t), w(t))$$

Которое представляет собой некий объект, описывающий динамику процесса обучения. Соответствующий дискретный вариант, каким бы способом дискретизации он не был получен, (методом Эйлера или более продвинутым методом численного интегрирования Ранги-Кутта или другими) мы будем считать его аппроксимацию.

Если на фазовом пространстве данного нейродифференциального уравнения (на пространстве, на котором определен  $x, x \in \mathbb{R}^n$ ) задано некое распределение  $P(x)$ , то оно будет меняться с течением времени  $t$  под действием потока этого нейродифференциального уравнения. Как собственно говоря под действием потока любого дифференциального уравнения. То есть на самом деле имеем  $P(x, t)$ .

Здесь возникают два вопроса:

- 1) Что будет происходить с функцией  $P(x)$  под действием потока нейродифференциального уравнения? Как она будет меняться?
- 2) Что мы хотим от этой функции  $P(x)$ ? Как она должна соотноситься с нашими выборками  $(\xi_1, \dots, \xi_n)$  и  $(\eta_1, \dots, \eta_n)$ ? Ответить на второй вопрос легче.

Мы хотим, чтобы в момент времени  $t = 0$ , то есть,  $P(x, 0)$ , она как можно меньше уклонялась от эмперической функции  $\hat{P}_0(x)$ .

По той же логике на выходе сети  $t = T$ ,  $P(x, T) \parallel \hat{P}_1(x)$ . ( $P(x, T)$  как можно меньше уклонялось от эмперической функции  $\hat{P}_1(x)$ .)

Хотим выборку на входе преобразовать в выборку на выходе так, чтобы преобразование производилось данной нейросетевой архитектурой.

Дивергенция Кульбака-Лейблицы (Kullback, Leibler)

$$D_{KL}(P(x) \parallel q(x)) = \int_{\mathbb{R}^n} q(x) \ln \frac{p(x)}{q(x)}$$

Такая функция не удовлетворяет требованиям метрики, но она настолько эффективна и популярна, что является методом по умолчанию.

Мы должны сказать, что наша функция  $P(x, t)$  для того чтобы реализовывать процедуру обучения данного нейродифференциального уравнения должна удовлетворять следующему свойству:

$$\lambda_1 \cdot D_{KL}(P(x, 0) \parallel \hat{P}_0(x)) + \lambda_2 \cdot (P(x, T) \parallel \hat{P}_1(x)) \rightarrow \min_{P(x, t)}$$

Где  $1 \geq \lambda_1, \lambda_2 \geq 0, \lambda_1 + \lambda_2 = 1$ , часто берут просто  $\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{1}{2}$

$q(x)$  и  $p(x)$  в данном случае заданы, интеграл дает определенное число. Мы функции  $P(x, t)$  дали в соответствие значение функционала, и мы хотим найти такую  $P(x, t)$ , которая бы минимизировала данный функционал.

Это классическая задача вариационного исчисления.

В отличие от классической постановки безусловного вариационного исчисления данная постановка имеет 3 ограничения:

$$1) \forall t \in [0, 1], P(x, t) > 0 \Leftrightarrow \int P(x, t) dx = 1$$

$$2) \begin{cases} \dot{x} = f(x(t), w(t)) \\ x(0) = x_0 \end{cases}$$

3)  $P(x, t)$  меняется под действием потока данного нейродифференциального уравнения не произвольно, а некоторым вполне определенным образом. Давайте выясним, как же меняется  $P(x)$  под действием потока дифференциального уравнения. Это уравнение Перрона-Фробениуса. УПФ.

Вначале обратимся к дискретному случаю (он проще). Рассмотрим отображение фазового пространства  $\mathbb{R}^n$  в себя.

$$x_{i+1} = f(x_i), f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$$

Рассмотрим один шаг данного отображения.  $y = f(x)$ . На самом деле это просто замена координат в пространстве  $\mathbb{R}^n$ . Предполагаем, что  $f(x)$  дифференцируема необходимое количество раз. Выбор системы координат произволен. Можем взять любые, которые получаются друг из друга диффеоморфными преобразованиями.

К сути рассматриваемого явления система координат не имеет. Физические законы независимы от системы координат. Вероятности и качественные свойства не зависят от системы координат.

Как меняются вероятности при смене системы координат? Давайте формализуем эту идею, построим математическую модель этого утверждения:

Возьмем произвольную точку  $y$  и некую ее бесконечно малую окрестность

$$\left[ y - \frac{\Delta y}{2}, y + \frac{\Delta y}{2} \right]$$

Где  $\Delta y$  бесконечно мало. Так же рассмотрим ее прообраз:

$$x_i : \left[ x_i - \frac{\Delta x}{2}, x_i + \frac{\Delta x}{2} \right]$$

У нас есть отображение  $f$ , оно отображает точки  $y$  в точки  $x_i$ .  $P(x)$  при этой замене координат преобразуется в  $q(y)$ , при этом мы требуем:

$$q(y)\Delta y = \sum_i P(x_i)\Delta x$$

Эта запись говорит о том, что вероятности сохраняются. При этом очевидно, что длины взятых окрестностей тоже будут меняться (для разных  $f$ )

Разделим последнее равенство на  $\Delta y$ , и устремим  $\Delta x \rightarrow 0$

$$q(y) = \sum_i p(x_i) \frac{\Delta x}{\Delta y}$$

По теореме об обратной функции получаем

$$q(y) = \sum_i p(x_i) / f'(x_i)$$

Нам будет удобно переписать это выражение пользуясь свойствами  $\delta$ -функции.

В математике кроме обычных привычных нам функций существуют так называемые «обобщенные» функции, которые представляют собой некое обобщение привычного понятия функции, сохраняющего его свойства, но не представимого в терминах отображения. Такие функции получаются естественным путем, причем естественным с точки зрения приложений, прикладной математики, и естественным с точки зрения чистой математики. С точки зрения чистой математики в рамках функционального анализа доказывается полнота пространства функций, интегрируемых в терминах  $L^2$ , то есть всех таких функций, для которых

$$\int_a^b f^2(x)dx < \infty$$

Но сюда попадают и другие весьма интересные функции. Одна из них  $\delta$ -функция (Дирака). Формально она определяется следующим образом:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ ?, & x = 0 \end{cases}$$

$$\int_{\mathbb{R}} \delta(x)dx = 1$$

Вся квантовая механика построена на этой функции. Откуда она берется? Давайте рассмотрим последовательность вполне приличных функций: это функции, которые равны  $n$  на промежутке  $\frac{1}{n}$ , и равны нулю на остальной области определения. Эти функции интегрируемы с квадратом, каждая из них принадлежит пространству  $L^2$ , интеграл для каждой равен единице.

Мы только что сказали, что пространство  $L^2$  полно, значит предел ряда последовательности таких функций тоже функция, которая принадлежит  $L^2$ . Что мы знаем про этот предел? Этот предел существует, он равен нулю во всех точках, не равных нулю, он уйдет к бесконечности в точке 0, но интеграл равен единице. Это и есть наша дельта-функция.

## Лекция 11. Численные методы решения задач вариационного исчисления.

Мы установили, что задача машинного обучения представляет собой вариационную постановку для некоторого сложного нелинейного уравнения в частных производных. Более того, если речь идет, действительно, о сильном искусственном интеллекте, то мы должны не просто найти метод решения этой задачи, но мы должны найти метод построения полной бифуркационной картины. То есть, множество всех ветвей решения, которые отвечают различным сценариям обучения этой нейросетевой системы, или различные варианты поведения системы сильного искусственного интеллекта. В идеале предполагается, что мы умеем управлять этими вариантами перехода между сценариями поведения. Мы должны поставить задачу оптимального управления, точнее, задачу оптимального управления в теории бифуркаций.

Пока что поговорим о более простых вещах.

Во всех практически значимых случаях не существует аналитического способа решения *нелинейных* уравнений в частных производных. Для линейных существует множество аналитических решений. Но мир нелинеен. И описывается *нелинейными* уравнениями в частных производных.

Классическим методом решения уравнений в частных производных, данных своей вариационной постановкой (это верно для функционалов от любого числа переменных, однако мы рассмотрим для двух ради понимания).

Имеем функционал:

$$I[u] = \int \int F(u, u'_x, u'_y, \dots) dx dy \rightarrow extr$$

Где  $u'_x = \frac{du(x,y)}{dx}$ ,  $u'_y = \frac{du(x,y)}{dy}$ ,  $u_{x^n y^m}^{n+m} = \frac{d^{n+m}u(x,y)}{dx^n dy^m}$

Первый классический метод решения уравнений в частных производных, данных вариационной постановкой, верно скорее для линейных, чем для нелинейных, носит название Ритца (Rietz). Он заключается в том, что мы представляем неизвестную функцию  $u(x, y)$  в виде конечного отрезка ряда:

$$u(x, y) = \sum_{i=1}^N a_i \cdot \varphi_i^*(x) \cdot \varphi_i^*(y)$$

Где  $\varphi_i^*(x), \varphi_i^*(y)$  – некие заданные функции, образующие систему ортогональных функций.



Один из мощных инструментов практического решения задач в прикладной математике являются так называемые системы ортонормированных функций.

Система ортонормированных функций – это система функций:

$$\{\varphi_i^*(x)\} \mid_{i=\overline{(1,\infty)}} \hookrightarrow \int \varphi_i^*(x)\varphi_j^*(x)dx = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

..... речь про то, что такое ортогональные функции TODO

Система ортогональных функций представляет собой базис в бесконечно мерном пространстве функций. Аналогично тому, как конечная система ортогональных векторов представляла собой базис в конечномерном пространстве векторов, то бесконечная система ортогональных функций представляет собой базис в бесконечномерном функциональном пространстве. Собственно говоря, функции .....

Примерами такого рода базиса является например базис Фурье. Всякая непрерывная функция и .....

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \varphi_i^*(x)$$

Кроме классического базиса Фурье существует масса других базисов (базисы Харра, Уорша, .....).

Общая теорема, устанавливающая необходимые условия того, что данная система функций действительно представляет из себя базис, носит название теоремы Стоуна-Вейерштрасса (Stone–Weierstrass). На идее ортогонального базиса основывается значительное число функций, различных методов решения различных методов задач. Например, если взять линейное уравнение в частных производных (в дифференциальной постановке) и подставите в него представление функции  $u(x, y)$  в виде такого ряда, то во многих практически значимых случаях вы сможете вынести  $\varphi_i^*(x) \cdot \varphi_i^*(y)$  и получите линейную алгебраическую систему порядка  $n$ . В таких случаях используют не привычный, медленный метод Гаусса, а более продвинутые методы численного решения.

Обратно к методу Рунге. Если мы подставим представление функции  $u(x, y)$  в наш функционал и при необходимости разложим функцию  $f$  в ряд Тейлора, мы тем самым превратим этот функционал просто в функцию многих переменных, а именно переменных  $a_i$ . Рассмотрим на примере:

$$\int_0^1 \int_0^1 \left[ \left( \frac{du}{dx} \right)^2 + \left( \frac{du}{dy} \right)^2 + 2f(x, y)u(x, y) dx dy \right] \rightarrow extr$$

.....

Подставим:

$$\int_0^1 \int_0^1 \left[ \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N a_i a_j \varphi_i'^*(x) \varphi_j'^*(x) \varphi_i^*(y) \varphi_j^*(y) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N a_i a_j \varphi_i^*(x) \varphi_j^*(x) \varphi_i'^*(y) \varphi_j'^*(y) + 2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N f_{a_i}^* a_j \right] dx dy \rightarrow extr$$

$$f(x, y) = \sum_{i=1}^{\infty} f_i^* \varphi_i^*(x) \varphi_j^*(y)$$

короче жуть. после курсовой допишу

Это выражение мы хотим отправить в экстремум.

Пусть часть с производными –  $b_{ij}^*$ , часть без производных  $c_{ij}^*$ , двойная часть  $-d_{ij}^*$

2

Таким образом мы ..... свели к решению существенно более простой задачи.

Нахождение .....

Более того в нашем конкретном случае поскольку задача является линейной (постановка представляет собой квадратичный функционал), то если мы сформулируем необходимое условие экстремума такой задачи (найдем частные производные  $\frac{ds}{da_i}$ ), то мы получим систему линейных алгебраических уравнений вида

$$\sum_{j=1}^N b_{ij}^* c_{ij}^* a_j = -f_i^* d_{ij}^*, i = \overline{(1, N)}$$

Замечание: в линейном случае, в случае квадратичного функционала мы получили систему алгебраических уравнений. В нелинейном случае, в случае, когда функционал вариационной постановки будет содержать кубические и более сложные члены, члены более высокого порядка, то мы все равно, используя метод Ритца придем к системе алгебраических или трансцендентных уравнений, но для ее решения придется применять методы численных решений алгебраических или трансцендентных уравнений, например тот же метод Ньютона. На практике при решении ...

Недостатки метода: при решении реальных задач для того чтобы достигнуть некоего разумного уровня точности, мы должны удерживать весьма большие  $N$ . Что приводит к серьезным вычислительным затратам.

Но это не главное. Главное то, что если мы ставим перед собой задачу не просто решения уравнения, данного своей вариационной постановкой, но отыскание всех решений, проведение полного бифуркационного анализа в полном его варианте,

Соответственно, метод хорош, но обладает двумя недостатками: мы удерживаем дикое количество слагаемых и данный метод не дает возможности бифуркационного анализа.

Официальная причина того, почему мы должны удерживать  $N$  большого порядка связано с тем, что мы, как бы, навязываем базис нашей системе. Ведь до решения такой системы мы не знаем, как выглядит функция  $u(x, y)$ . Мы представляем ее в виде суммы вполне конкретных функций.

.....

Если мы займемся реальными волновыми процессами, то в мгновение ока мы обнаружим, что волновые процессы описываются солитами.

Что делать с большим размером  $N$ ? метод носит название метода Кантаровича. Он предложил следующее:

$$u(x, y) = \sum_{i=1}^N a_i \cdot \varphi_i(x) \cdot \varphi_i^*(y)$$

Можно сделать наоборот. Мы будем раскладывать неизвестную нам функцию, а вторую мы будем считать по-прежнему неизвестной. Мы подставляем это выражение в наш функционал. В результате в представлении метода Кантаровича мы получаем функционал, зависящий от функции  $\varphi_i(x)$ , то есть от функции одной переменной. Вариация по этим функциям даст нам систему ОДУ, относительно системы  $N$  функций от  $\varphi_i(x)$ , точнее краевую задачу для этой системы ОДУ. Как решать такого рода задачу мы уже знаем. Метод сведения нелинейной краевой задачи к эквивалентной задаче Коши, использующий итерационную формулу метода Ньютона. Более того, эти методы настолько сочетаются, что часто называют методом Ньютона-Кантаровича. Такое представление, представление метода Кантаровича, дает нам сильный результат:

Если вариация функции вдоль направления  $y$ , а точнее, вдоль тех направлений, где мы задаем функцию, где мы ставим \*, невелика, то мы действительно можем ограничиться незначительным числом  $N$ .

Второе, более важное свойство, заключалось в том, что, коль скоро мы получаем метод Ньютона, то мы сразу получаем всю теорию бифуркационного анализа, теорема ..., но результат сильно зависит от  $N$ . Можно проверить  $N$  в каком-то разумном ..

Недостатки тоже очевидны. Никто не говорил, что искомое решение будет мало изменяться относительно  $y$ . Если это не выполняется, то так же, как и в Ритца, нужно держать много переменных, к тому же ....

## Лекция 12.

Хотим строить полную бифуркационную картину для нелинейных ...

Обратимся к классу методов, который подразумевает, что у нас есть ..

$$u(x, y) = \sum_{i=0}^k h_{i(x)} g_{i(y)}^* \text{ (ИОМК)}$$

Постановка метода Кантаровича, где у нас одна функция «известна».

Подстановка такого представления в вариационную постановку для краевой задачи, для нелинейных уравнений в частных производных, даст нам функционал, который зависит от неизвестных функций одной переменной:

$$\{h_{i(x)}\}$$

Вариация такого функционала даст нам систему интегро-функциональных уравнений, решение которого представляет собой задачу не более простую, а может даже и более сложную, чем решение исходной нелинейной краевой задачи для уравнений в частных производных.

Итерационный обобщенный метод Кантаровича дает нам способ быстрого, эффективного решения данной задачи. Обратимся в начале к примеру:

$$J[u(x, y)] = \int_0^1 \int_0^1 \left[ \left( \frac{du}{dx} \right)^2 + \left( \frac{du}{dy} \right)^2 + 2f(x, y)u(x, y) \right] dx dy \rightarrow extr$$

Получаем следующее:

$$J[h(x), g(y)] = \int_0^1 \int_0^1 \left[ (h'(x))^2 g^2(y) + h^2(x) (g'(y))^2 + 2f_{x(x)} f_{y(y)} h(x) g(y) \right] dx dy \rightarrow extr$$

Проварьируем наш функционал относительно функции  $h(x)$  и  $g(y)$ , считая их независимыми, подобно тому, как мы независимо дифференцировали по коэффициентам разложения в методе Рунта.

$$\begin{aligned} \delta h(x) : dJ &= \int_0^1 \int_0^1 \left[ \underbrace{(h'(x))^2}_{\text{сократится}} + 2h'(x)\delta h(x) + \underbrace{\delta h'^2(x)}_{\rightarrow 0} \right] g^2(y) - \\ &- (h'(x))^2 g^2(y) + 2h(x)\delta h(x)(g'^2(y) + 2f_x(x)f_y(y)g(y)\delta h(x)) \Big] dx dy = \\ &= \int_0^1 h'(x)\delta h(x) \Big|_{x=0,1} g^2(y) \dots \end{aligned}$$

Далее мы включаем стандартную логику вариационного исчисления.  $\delta h(x)$  – не просто бесконечно малое, это произвольная бесконечно малая функция. Следовательно, если мы хотим, чтобы этот интеграл был равен нулю, то мы с необходимостью должны потребовать, чтобы выражение перед  $\delta h(x)$  равно нулю. Если мы предположим, что хотя бы в одной точке  $x_0$  подинтегральное выражение не обращается в ноль, то по непрерывности решения соответствующего выражения, оно не обращается в ноль в некоторой, возможно малой, окрестности этой точки. Давайте для определенности, не ограничивая общности, считать, что это выражение в окрестности ... строго больше нуля. Тогда нам достаточно взять в качестве вариации  $\delta h(x)$  как функцию, которая равна нулю всюду, кроме окрестности точки  $x_0$ . Соответственно:

$$-h''(x) \int_0^1 g^2(y)dy + h(x) \int_0^1 (g'(y))^2 dy + f_x(x) \int f_y(y)g(y)dy = 0$$

Полученное уравнение (уравнение Эйлера-Лагранжа) принадлежит классу интегро-дифференциальных уравнений, поскольку неизвестные функции входят как под операторам дифференцирования, так и под оператором интегрирования. Анализ первого слагаемого в предыдущем выражении позволяет сформулировать нам граничные условия для этого выражения.

$$[h'(0)\delta h(0) - h'(1)\delta h(1)] \int_0^1 \varphi(y)dy$$

Таким образом мы получили не только систему интегро-дифференциальных уравнений, но и граничные условия.

$Jg(y)$  даст нам другую систему интегро-дифференциальных уравнений.

$$-g''(y) \int_0^1 h^2(x)dx + g(y) \int_0^1 (h'(x))^2 dx + f_y(y) \int f_x(x)g(x)dx = 0$$

И соответствующие граничные условия для него:  $g'(0) = 0, g'(1) = 0$

Оба эти интегро-дифференциальные уравнения должны быть объединены знаком системы. Таким образом, в результате варьирования мы получили систему интегро-дифференциальных уравнений, состоящую из четырех уравнений.

Возвращаемся к ИОМК. Вместе с тем, структура этой системы интегро-дифференциальных уравнений такова, что позволяет организовать весьма эффективный итерационный процесс, сходящийся к исходному решению решаемой вариационной постановки.

Возьмем начальное приближение  $g = g^{(0)}(y)$ , где  $g^{(0)}$  – некоторая заданная функция. Тогда в нашем уравнении все определенные интегралы станут просто конкретными числами. Тогда мы получим обычное ОДУ относительно  $h''(x)$

$$-Ah''(x) + Bh(x) + Cf_x(x) = 0$$

Решая эту систему методом Ньютона, мы получаем ее некое решение  $h^{(1)}(x)$

Если во вторую часть подставить полученное  $h^{(1)}(x)$ , все интегралы снова станут числами, и мы получим снова обычную систему ОДУ, которую мы снова можем решить методом Ньютона. Получаем следующую цепочку:

$$g = g^{(0)}(y) \xrightarrow{H} h^{(1)}(x) \xrightarrow{H} g^{(1)}(y) \rightarrow \dots$$

В пределе этого итерационного процесса мы получим решение исходной задачи.

*Замечание:* Сходимость этого процесса доказана в весьма широком классе решений.

Критерием останова этого итерационного процесса является малость нормы разности решения исходной задачи на последовательных итерациях. Задав априори некоторым  $\varepsilon > 0$ , которое в отрывке математического анализа считается конечным числом, например  $10^{-4}$ . Мы завершаемся, когда:

$$\|h^{(i-1)}(x)g^{(i-1)}(y) - h^{(i)}(x)g^{(i)}(y)\| < \varepsilon$$

Можно брать любую норму функционального пространства, но лучше брать  $\|u\| =$  Есть паразитное решение:  $h(x) \equiv 0, g(y) \equiv 0$ , которого на самом деле нет у исходной системы. Это является недостатком метода, поскольку при  $h, g$  близким к нулю, это выражение имеет тенденцию прыгать между истинным и паразитным решением.

*Замечание:* вариационная постановка при своем варьировании дает не только интегро-дифференциальные соотношения, но и естественные граничные условия. При этом вариационная постановка эквивалентна именно системе, составленной из естественных граничных условий и уравнений Эйлера-Лагранжа. Поэтому, если мы по природе задачи видим, что граничные условия должны быть другими, то мы должны либо менять вариационную постановку, иногда на весьма непривычную, либо заменить естественные граничные условия на те граничные условия, которые нам нужны, точнее, результат их преобразования в следствие ...

При этом это не произвольное действие, здесь мы оперируем на соответствующую теорему вариационного исчисления. Теорема гласит о том, что добавление любого набора условий стационарности, хоть дифференциальных, хоть граничных, не меняет задачу вариационного исчисления.

*Замечание:* если мы предположим как обычно, что рассматриваемая задача зависит от некоторого набора параметров  $\mu \in \mathbb{R}^s$ , то задача фиксации предельных особых точек, или точек бифуркации, для нелинейной краевой задачи уравнения в частной производных, будет достаточно тривиальной, если на последней итерации ИОМК хотя бы одна из матриц Фрише (или обе сразу) вырождается на последней итерации соответствующего метода Ньютона, то мы можем утверждать, по совершенно очевидной логике, что мы имеем дело с особой точкой исходного уравнения в частных производных. Тем самым, мы решаем задачу построения полной бифуркационной картины для уравнения в частных производных. Она представляет собой декартово произведение бифуркационных картин для интегродифференциальных уравнений, дающих нам  $h(x)$ ,  $g(y)$ . Применять эти методы, о которых мы говорили в связи с методом Ньютона, связанные с .... мы получаем возможность решить задачу ....., которую мы можем решить в .....

## Лекция 13.

Почему когда мы решаем эту задачу мы используем то представление, которое использовалось в ИОМК?

$$u(x, y) = \sum_{i=0}^k h_{i(x)} g_{i(y)}$$

Любому человеку понятно, что это не самое общее представление функции от двух переменных. Вообще говоря общее представление – функция от  $n$  переменных.

Это подводит нас к теореме Колмогорова-Арнольда и ее применению при решении нелинейных уравнений в частных производных.

Вопрос о представлении функции многих переменных через суперпозицию функции одной переменной составляет существо 13-ой проблемы Гильберта: в самом начале 20 века Девид Гильберт сформулировал 25 проблем, самых сложных проблем в чистой прикладной математике на тот момент времени. Три из них не решены до сих пор. Еще несколько переформулированы таким образом, чтобы быть более трактуемыми в формальных математических терминах. Однако для 13-ой проблемы решение было найдено нашими соотечественниками Андреем Николаевичем Колмогоровым и его учеником Владимиром Игоревичем Арнольдом. Оно выражается в знаменитой теореме Колмогорова-Арнольда (KST, Kolmogorov Superposition Theorem), которая гласит следующее:

Всякая непрерывная функция  $n$  переменных представима в виде:

$$u(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^{2n+1} \chi_i \left( \sum_{j=1}^n \varphi_{ij}(x_j) \right)$$

Где  $\chi_i$  и ... представляют собой непрерывные функции одной переменной. На вопрос Гильберта был дан положительный ответ, причем ответ удивительный. Во-первых, следует подчеркнуть, что в формулировке теоремы Колмогорова-Арнольда фигурирует точное равенство (не аппроксимация). Необходимое число функций весьма мало. Необходимое число внутренних функций – число переменных ( $n$ ). Для функции от двух переменных это число 2. Внешних функций требуется  $2n + 1$ . В рамках этой теоремы Колмогорова-Арнольда показали, что внутренние функции могут быть одинаковыми для всех непрерывных функций  $u$ . А вот внешние функции  $\chi_i$  уже специфичны для функции  $u$ , представление которой мы ищем.



Указанное представление является предельно сильным. И породило гигантское количество всевозможных приложений. В частности, следствие из теоремы Колмогорова:

$$u(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^{2n+1} \chi_i \left( \sum_{j=1}^n d_{ij} \varphi_j(x_j) \right)$$

.....

Такое представление является основой всех нейросетевых представлений. Формально мы здесь показали, что мы можем построить нейронную сеть, которая состоит всего лишь из двух слоев. Нам нужно только лишь выбрать в качестве функции активации внутреннего слоя функции  $\varphi_j$ , а в качестве функции активации внешнего слоя функции  $\chi_i$ . Тогда обучив нейронную сеть таким образом, чтобы веса, ведущие от первого слоя ко второму были в точности равны этим Колмогоровским коэффициентам ....

Мы получаем ....

Соответствующее утверждение появилось на заре нейронных сетей, носит название теоремы Hecht-Nielsen, сейчас это тренд в нейронных сетях, им активно занимаются. Называются KAN сети, Kolmogorov-Arnold's Networks.

Возвращаясь от нейронных сетей к теореме Колмогорова-Арнольда, практической ... сдерживалось двумя обстоятельствами:

- 1) В оригинальном доказательстве Колмогорова существование как внутренних так и внешних функций просто доказывалось, но мы не имели представления о том, как их реально строить. Но это только половина беды.
- 2) Внутренние, да и внешние, функции представляли собой специфический математический объект. Они были всюду непрерывны, но нигде не дифференцируемы. В математике такого рода функции носят названия Чертовых Лестниц, devil's staircase.

Первая проблема была решена уже в 60-х годах прошлого века. Советско-американский математик David Scprecher построил алгоритм построения внутренних функций в явном виде.

Однако гораздо более сильным результатом в этом направлении были результаты шведского математика Хедберга, который показал, что представление Колмогорова-Арнольда имеет место не только для тех конкретных функций, которые доказал Колмогоров, но для весьма большого числа функций, из пространства  $C[0,1]$ . Те функции, для которых это верно, они «плотны» в множестве всех непрерывных функций. С практической точки зрения это значит, что если вы берете функцию  $\varphi$ , то если вам удастся найти функцию  $\chi$ , то вы получаете точное Колмогоровское приближение. Это первый шаг. Утверждение носит название теоремы ... .

Второй вопрос представлялся существенно более болезненным. Примерно в одно время с Колмогоровым было показано, что если мы потребуем от функции не только непрерывность, но еще и аналитичность (сильная гладкость), то утверждение Колмогорова-Арнольда неверно. Возникает естественный вопрос: имеет ли это практическое применение?

Для наших целей, а именно для построения полной бифуркационной картины этот спор не важен по одной причине: если мы рассмотрим множество всех функций  $\chi_i$ , которые фигурируют в представлениях и рассмотрим те функции  $\chi_i$ , которые не просто фигурируют в представлении функции  $u$ , но фигурируют в представлении тех функций, которые являются решениями наших ОДУ, то поскольку функция  $u$  дифференцируема, то дифференцируемыми являются все функции  $\chi_i, \varphi_j$ .

... представляют собой предел некоторого итерационного процесса. На каждом шаге этого итерационного процесса мы знаем значения этих функций в конечном числе точек, а потом мы можем считать их гладкими в той степени, в которой нам захочется. Поскольку мы являемся прикладными математиками, то мы в общем-то всегда имеем дело с функциями из численных методов, соответственно, с функциями известными в конечном числе точек. С формальной точки зрения здесь нет никакого противоречия. Однако с точки зрения вычислительной математики это может приводить к весьма неприятным последствиям, ведь численно удерживаться на этом подмногообразии функций нам не удастся, мы все время соскакиваем и оказываемся с численной точки зрения в заборах, *wild functions*, что затрудняет численный счет. Некие результаты в этой области были получены.

Нам понадобится еще одно следствие из теоремы Колмогорова-Арнольда о суперпозиции. Уже в 21-ом столетии Rauf Doss доказал очевидное следствие:

$$u(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^{2n+1} \chi_i \left( \prod_{j=1}^n \varphi_j(x_j) \right)$$

В этой ситуации мы получаем произведение. Из этого утверждения получаются два следствия, рассмотрим их в терминах функции от двух переменных (для упрощения)

$$u(x, y) = \sum_{i=1}^5 \chi_i(\varphi_1(x) \cdot \varphi_2(y))$$

1) Давайте разложим эту функцию в ряд Тейлора в окрестности нуля (можем и в окрестности любой заданной функции, но сделаем в окрестности нуля, так как для любой сложной системы существует решение близкое к нулю, в физике это, например, термодинамическая ветвь):

$$\approx \sum_{i=1}^5 \chi_i(0) + \sum_{i=1}^5 \chi'_i(0) \cdot \varphi_1(x) \cdot \varphi_2(y)$$

Получаем метод Кантаровича. Чем больше слагаемых удержите, тем точнее будет аппроксимация. Ничего нам не мешает обобщить Итерационный Обобщенный метод Кантаровича. Не будем ничего раскладывать в ряд Тейлора. Будем работать с изначальной, точной, формулировкой. Но тогда мы имеем суперпозицию функций от одной переменной, просто они более сложные.

$$u(x, y) = \sum_{i=1}^5 \chi_i(z)(\varphi_1(x) \cdot \varphi_2(y))$$

$\chi_i(z)$  являются функциями одной переменной. Если мы применим логику ИОМК и будем отыскивать в рамках аналогичного итерационного процесса и  $\varphi_1(x)$  и  $\varphi_2(y)$  и  $\chi_i$ , то мы получим на каждой итерации такого процесса разрешающие соотношения для вышеуказанных функций одной переменной, причем эти разрешающие соотношения будут представлять собой краевые задачи для ОДУ, которые мы знаем как решать.

*Замечание.* Самое важное, что следует подчеркнуть: в независимости от того какую формулировку теоремы Колмогорова-Арнольда мы выберем и какой метод, аналогичный ИОМК мы не построим, мы все равно получаем какое-то последовательное применение метода Ньютона для решения каких-то краевых задач для ОДУ.

Соответственно, вся теория фиксации точки бифуркаций, определение их типа, отыскание исходящих из них ветвей решения, соотнесение с теорией катастроф, построение полной бифуркационной картины получается естественным образом. Для одномерного случая мы это просто знаем. А в случае многих переменных через различные формулировки теоремы Колмогорова-Арнольда все сводится к функциям от одной переменной. Таким образом мы получаем базовую задачу, а именно решение задачи построения полной бифуркационной картины для нелинейных уравнений в частных производных, данной постановки задачи. Именно к этому классу .... относится машинное обучение. Соответствующие разделы машинного обучения являются некой численной аппроксимацией соответствующего непрерывного случая.

*Замечание.* Мы говорим о вариационных постановках. Проблема заключается в том, что, зачастую, дифференциальная постановка задач машинного обучения встречаются производные нечетных порядков.

$$\frac{dP}{dt}(x, t)$$

Мы не можем ничего проварьировать, для решения такой постановки. Решение было найдено тремя немецкими математиками Jordon, Kinderlehrer, Olto, ЖКО. Идея заключалась в достаточно простой вещи: на том месте, функциональная вариация которого должна давать нам производную, должен стоять объект, который при вариации дает аппроксимацию данной производной. Разностная вариация.

$$\frac{(-u(x, t - \Delta t) + u(x, t))^2}{2h}$$

При этом формально мы считаем что при движении по времени, координате  $t$ , мы имеем наши вариационные постановки, определенные на малых, конечных промежутках времени длины  $\Delta t$ . Тогда приступая к поиску функции на промежутке  $(t, t + \Delta t)$ , мы уже знаем функцию  $u(x, \Delta t)$ , она не подлежит варьированию на этом промежутке. Следовательно, вариация такого выражения даст нам

$$\frac{u(x, t) - u(x, t - \Delta t)}{h}$$

Что близко к производной  $\frac{du}{dt}$ . Погрешность такого приближения:  $O(\Delta t)$ . Делая его малым, мы получаем вариационную постановку, к которой можно применять ИОМК. Это та идея, которую предложили ЖКО.

Не обязательно рабски следовать их идее. Мы можем ввести соответствующее слагаемое функционалом, формально, и просто его варьировать. Тогда в результате вариации мы получим, соответственно, не ОДУ, но так называемые дифференциальные уравнения с задержкой. Это класс дифференциальных уравнений, в которых кроме самой функции и ее переменных так же фигурируют функции, зависящие не от времени  $t$ , а от времени  $t - a$ , где  $a$  — фиксированная константа.

Если мы говорим о сильном искусственном интеллекте, то мы говорим о умении перехода между состояниями ...

Эти переходы с математической точки зрения дают нам теорию бифуркаций для нелинейных ОДУ, выраженных вариационной постановкой.

Применение ИОМК позволяет нам строить бифуркационные картины и заниматься решением как прямых, так и обратных задач и задач управления.

## Лекция 14. Хаотические системы и ряды. Старший показатель Ляпунова.

Существует множество определений сложных систем, которые друг с другом конкурируют, единого определения пока нет. Поэтому все, чем мы можем оперировать – признаками, которые мы наблюдаем у сложных систем, в том числе у сильного искусственного интеллекта.

В геометрии это так называемые фрактальные множества, которые не являются поверхностями даже в окрестностях.

В динамике – хаотические системы и ряды.

В эволюции – катастрофы и бифуркации (фазовые переходы).

В статистике – работа со степенными законами.

В теории графов – сложные сети.

В статистической механике – неравновесные системы, системы далекие от равновесия. За пределами принципа максимума энтропии. Начало термодинамики говорит нам, что любая замкнутая система ведет себя так, чтобы с течением времени энтропия максимизировалась. В силу того, что наши системы открытые, принцип максимума энтропии нарушается.

Начнем с хаотических систем и рядов. Первый вопрос – что такое хаотические системы и ряды? Формального, единого определения хаоса не существует. Все определения разные и конкурируют друг с другом. Но так же как со сложными системами у нас есть некий набор признаков, который позволяет отличать хаотические системы и хаотические ряды от регулярных систем. Эти признаки носят название «Отпечатки пальцев хаоса».

Первый отпечаток хаоса, о котором мы поговорим – горизонт прогнозирования. Здесь мы будем рассматривать временные ряды, разворачивающиеся во времени последовательностью  $y_0, y_1, \dots, y_t, \dots \in \mathbb{R}^n$ . Мы будем предполагать, что рассматриваемый нами временной ряд представляет собой точки траектории некоторой динамической системы, описываемой системой ОДУ. Рассмотренные через одинаковые моменты времени (не является догмой) наблюдения. Можно работать и с временными рядами, где значения сняты в произвольные моменты времени. Гораздо более сильным предположением является предположение о том, что за наблюдаемым временным рядом стоит именно система ОДУ, что наблюдения являются решением, траекторией системы ОДУ. В большинстве случаев гораздо естественнее было бы предложить, что речь идет о нелинейных

уравнениях в частных производных, или о других, еще более сложных математических объектов.

Например, если мы возьмем наблюдения погоды, очевидно, что такой ряд будет следствием движения воздушных масс в атмосфере и водных масс в океане. А эти уравнения совсем не являются ОДУ, они являются нелинейными уравнениями в частных производных, так называемые уравнения Навье-Стокса (Navier-Stokes).

Тем ни менее в классической теории хаотических систем мы будем работать с предположением, что за наблюдаемым рядом стоят ОДУ, нам так проще.

Временные ряды, как и стоящие за ними динамические системы, делятся на два больших непересекающихся класса, которые носят названия регулярные и хаотические. Первым признаком, который отличает эти два класса между собой, является наличие горизонта прогнозирования.

Под горизонтом прогнозирования мы будем понимать число шагов вперед, на которое мы можем спрогнозировать наблюдаемый ряд после того как мы завершили его наблюдение. Для регулярных рядов горизонт прогнозирования (хотя бы теоретически) бесконечен. А вот для хаотических рядов горизонт прогнозирования конечен, более того это вполне конкретная величина, вычисляемая по ряду.

Следует понимать, что горизонт прогнозирования не следствие нашего незнания, несовершенства имеющихся алгоритмов, но является законом природы. Таким же, как закон всемирного тяготения.

Мы говорили, что, рассматривая систему ОДУ, мы вместе с тем должны рассматривать ее поток, множество ее решений, множество ее траекторий, которые начинаются в различных точках фазового пространства. В начале 20-го века Александром Михайловичем Ляпуновым была предложена классификация этих траекторий динамической системы. Он предложил делить их на устойчивые и неустойчивые.

Траектория  $x(t)$  динамической системы  $\dot{x} = f(x)$  называется устойчивой по Ляпунову, если

$$\forall \varepsilon > 0 \exists \delta(\varepsilon) > 0 : \|x(0) - \tilde{x}(0)\| < \delta \Rightarrow \|x(t) - \tilde{x}(t)\| < \varepsilon \quad \forall t > T > 0$$

Где  $\tilde{x}(t)$  есть другое решение, другая траектория  $\dot{x} = f(x)$ , которая начинается в точке  $\tilde{x}(0)$ , достаточно близкая к  $x(0)$ . С точки зрения здравого смысла, любая траектория, которую мы вообще можем назвать траекторией, является устойчивой по Ляпунову.

Однако бывают и неустойчивые траектории по Ляпунову. Траектория называется неустойчивой по Ляпунову, если:

$$\forall \delta > 0 \quad \forall E > 0 \quad \exists T > 0 : \|x(0) - \tilde{x}(0)\| < \delta \Rightarrow \|x(t) - \tilde{x}(t)\| \geq E \quad \forall t > T > 0$$

Где  $E$  сколь угодно большое. Сколь бы близко они не были в начале, траектории разойдутся к моменту  $T$ . Ляпуновом было показано (первая теорема Ляпунова), что если траектория является неустойчивой по Ляпунову, то траектории  $x(t), \tilde{x}(t)$  не просто расходятся, а расходятся с экспоненциальной скоростью, то есть:

$$\|x(t) - \tilde{x}(t)\| \sim e^{\lambda t}, \lambda > 0$$

Этот показатель  $\lambda$  получил название старшего показателя Ляпунова. Для хаотических систем он положителен, для регулярных отрицателен. Так же промежуточный случай, когда  $\lambda = 0$ , этот случай носит название квазипереодического движения. Все хаотические траектории, хаотические ряды неустойчивы по Ляпунову. Все регулярные ряды устойчивы по Ляпунову.

Так как хаотические траектории являются неустойчивыми по Ляпунову, выходит, они не являются траекториями в привычном нам понимании.

Понятие горизонта прогнозирования следует из понятия неустойчивости по Ляпунову, из положительности старшего показателя Ляпунова, следует следующим образом:

Пусть у нас есть временной ряд и мы перестали его наблюдать в момент  $t_0$ . Мы делаем прогноз на один шаг вперед, хотим получить знание в точке  $t = t_0 + \Delta t$ . Где  $\Delta t$  – шаг временного ряда. Сколь бы ни был точен наш прогноз, он всегда содержит ошибку. Она может быть минимальной, но она будет. Значит мы рядом с истинной траекторией должны стартовать некую другую траекторию, которая называется прогнозной.

Есть истинная траектория, которую мы не знаем, и прогнозная, которую мы знаем, но не уверены, имеет ли она отношение к истинной. Рассматриваем две траектории одной и той же динамической системы, которая в моменте  $t_0 + \Delta t$  находятся на каком-то малом расстоянии друг от друга.

Мы сказали, что хаотические системы неустойчивы по Ляпунову. Это означает, что две траектории, истинная и прогнозная, начнут удаляться друг от друга. Хуже того, начнут удаляться с экспоненциальной скоростью. Разница между ними в момент времени  $t$  есть следующая величина:

$$\|x(t) - \hat{x}(t)\| = \|x(t_0 + \Delta t) - \hat{x}(t_0 + \Delta t)\| = e^{\lambda t}$$

Где  $\lambda$  – старший показатель Ляпунова.



Тогда, если мы обозначим эту начальную разность через  $\varepsilon_0$ :

$$\varepsilon_0 = \|x(t_0 + \Delta t) - \hat{x}(t_0 + \Delta t)\|$$

А левую норму через  $\varepsilon_{\max}$ , которое следует из какого-то здравого смысла:

$$\varepsilon_{\max} > \|x(t) - \hat{x}(t)\|$$

Тогда мы мгновенно получаем величину горизонта прогнозирования:

$$T = \frac{1}{\lambda} \ln \frac{\varepsilon_{\max}}{\varepsilon_0}$$

Через  $T$  шагов истинная прогнозная траектории разойдутся больше чем на  $\varepsilon_{\max}$ .

Эта величина и носит название горизонта прогнозирования. Он не связан с несовершенством наших методов, а просто является следствием закона природы.

Горизонт прогнозирования очевидным образом зависит от  $\varepsilon_0, \varepsilon_{\max}$ , где как минимум  $\varepsilon_{\max}$  является нашим произволом, а  $\varepsilon_0$  зависит от метода.

Поэтому специалисты предпочитают оперировать в терминах старшего показателя Ляпунова. И классифицируют ряды именно в терминах  $\lambda$ .

$\lambda < 0$  — регулярный ряд,  $T = +\infty$ .

$\lambda = 0$  — квазипериодическое движение.  $\lambda > 0$  — хаотический ряд,  $T < +\infty$ .

Это и есть первый отпечаток хаоса.

Диффузов существует бесконечное количество, а типов движения существует очень ограниченное количество. Они все классифицированы и исследованы.

Формально старший показатель Ляпунова определяется через понятие линеаризации системы ОДУ.

Пусть  $\dot{x} = f(x)$ , где  $x \in \mathbb{R}^n$ , система ОДУ. И пусть  $x_0(t)$  — некая ее траектория.

Тогда линеаризация  $\dot{x} = f(x)$  в окрестности  $x_0(t)$  строится следующим образом:

Рассмотрим траекторию  $x_0(t) + \varepsilon u(t)$ , где  $\varepsilon$  мало. Тогда подставим эту новую траекторию в нашу исходную систему:

$$\dot{x}_0(t) + \varepsilon \dot{u}(t) = f(x_0 + \varepsilon u(t))$$

Разложим правую часть в ряд тейлора, пользуясь малостью  $\varepsilon$ :

$$f(x_0(t) + \varepsilon u(t)) = f(x_0(t)) + Df(x) \cdot \varepsilon u(t) + o(\varepsilon^2)$$

$$Df(x) = \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} \Big|_{x=x_0(t)}$$

Сократим  $f(x_0(t))$  и пренебрежим  $o(\varepsilon)$ :

$$\dot{u}(t) = Df(x_0) \cdot u(t)$$

Относительно новой переменной  $\dot{u}(t)$  это так же является системой дифференциальных уравнений, но системой линейной, которая носит название линеаризации исходной системы  $\dot{x} = f(x)$  в окрестности траектории  $x_0(t)$ .

Замечание. Если  $x_0(t)$  является особой точкой исходного уравнения  $\dot{x} = f(x)$ , то, как легко видеть,  $Df(x)$  будет константной матрицей. Тем самым линеаризация будет не просто линейным ОДУ, но линейным ОДУ с постоянными коэффициентами. Для систем такого рода существует формула, которой их можно решить. Другой практически значимый случай: пусть  $x_0(t)$  является замкнутой траекторией. В качественной теории ОДУ они называются предельными циклами:

$$x_0(t + T) = x_0(t)$$

Тогда нетрудно догадаться, что матрица  $Df(x_0)$  будет состоять из периодических функций с этим же периодом  $T$ .

Половина того, что называется качественная теория ОДУ основана на операции линеаризации. Если быть более точным, при некоторых технических условиях теорема Гробмана-Хартмана (grobman-hartman) позволяет нам отождествить траектории исходной системы с траекториями ее линеаризации в некоторой малой окрестности  $x_0(t)$  (если точнее, построить между ними диффеоморфное отображение), тогда мы заменяем исследование исходной системы исследованием ее линеаризации. Линеаризацию исследовать легко.

Пусть  $\dot{x} = f(x), x \in \mathbb{R}^n$ . Есть исследуемая система, пусть  $\dot{u} = A(t)u(t)$  является ее линеаризацией в окрестности некоторой траектории  $x_0(t)$ . Тогда показателем Ляпунова является:

$$\lambda = \overline{\lim}_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \|u(t)\|$$

В большинстве практически значимых случаев можно брать обычный предел. Это величина является показателем Ляпунова и является фундаментальной характеристикой системы. Как мы видим она зависит от какой-то траекторий, которых у нас континуум. Выходит мы имеем континуум. Значит показателей Ляпунова тоже континуум.

Мультипликативная эргодическая теорема. Идея заключается в том, что величина  $\lambda$  может принимать ровно  $n$  различных значений  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ , которые в совокупности носят название Ляпуновского спектра. Наибольший из них носит название Старшего показателя Ляпунова. Который, как было сказано ранее, является критерием регулярности / хаотичности системы и порождаемого ей ряда.

Более того, обычно  $\lambda_1 > 0, \lambda_2 = 0$ , все остальные отрицательны. Классическая ситуация. Однако бывают и более сложные ситуации. Когда несколько показателей Ляпунова положительны. Тогда говорят о гипер-хаосе. Это встречается в природе.

## Лекция 15. Энтропия Колмогорова-Синая.

Начали изучение хаотических систем, ввели старший показатель Ляпунова. Ввели понятие Ляпуновского спектра и старшего показателя Ляпунова как его максимального значения. Все значения спектра носят название линейных показателей Ляпунова, потому что они зависят лишь от одной траектории линеализированной системы. Кроме линейных(одномерных) показателей Ляпунова существуют еще объемные, или многомерные показатели Ляпунова, которые определяются следующим образом:

$$\kappa_m = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \sqrt{\det \left( \begin{pmatrix} u_{11}(t) & & u_{m1}(t) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{1n}(t) & & u_{mn}(t) \end{pmatrix} \right)}$$

Матрица, фигурирующая в определении составлена из столбцов, которые представляют собой линейно независимые решения линеализации исследуемой системы. Теория говорит нам, что их  $n$  штук, но в данном случае  $m < n$ . Для одномерного, линейного, случая, так называемого случая общего положения, является ситуация  $\lambda = \lambda_1$  и мера тех начальных условий в пространстве  $\mathbb{R}^n$ , с которых мы можем достигнуть других элементов Ляпуновского спектра, равна нулю. Соответственно, для объемного показателя ляпунова таким значением  $\lambda_j = \kappa_j - \kappa_{j-1} \cdot \dots \dots$

*Замечание.* Это дает нам способ вычисление всего Ляпуновского спектра. Достаточно сказать, что ...

$$\kappa_m = \lambda_1 + \dots + \lambda_m$$

Особый интерес представляет случай  $m = n$ . В этой ситуации матрица представляет собой так называемый определитель Вронского – Вронскиан. Нам важно не это, а что при  $m = n$  объемный показатель Ляпунова дает нам фундаментальную классификацию всех систем на диссепативные и консервативные.

Все системы в мире делятся на две категории: диссепативные и консервативные.

Консервативные системы (от лат. консерватио – сохраняют) это системы, в которых выполняется один или более законов сохранения, например закон сохранения энергии.

Диссепативные системы (от лат. диссепатио – рассеивает) это системы в которых все законы сохранения нарушается. Консервативные системы являются каким-то допущением, но нам легко с ними работать. Есть значительная часть реальных систем, которые нам удобно считать консервативными, в которых мы можем

принебресь диссепативными эффектами. Однако следует явно понимать, что есть системы, где диссепативные эффекты принципиальны. (например теория самоорганизации, которая строится на том, что нарушаются ....., по сути это теория диссепативных систем)

Для консервативных систем  $\kappa_m = 0$ .

Для диссепативных систем  $\kappa_m < 0$ , что дает нам некую характеристику.

Энтропия Колмогорова-Синая, или почему хаотические системы производят информацию. Мы установили, что все хаотические системы порождают множество траекторий, неустойчивых по Ляпунову. Мы не можем работать с этими траекториями, соответственно, и с этими системами так, как бы мы работали с обычными детерминированными системами, например теми, что описываются системами ОДУ.

Достаточно долгое время было непонятно, как работать с такого рода системами. Однако в 60-е годы прошлого столетия Колмогоров предложил, что, несмотря на то, что они полностью детерминированные, рассматривать их как системы вероятностные и работать не с отдельными траекториями, а с некоторыми распределениями, порождаемыми этими системами и с некоторыми понятными нам характеристиками (математическим ожиданием, дисперсией, и подобным).

..... Если мы будем продливать траекторию в квадрате бесконечно, мы сможем ....

Устремив  $t \rightarrow \infty$ , а  $\varepsilon$ , диаметр квадрата, стремится к нулю, тогда мы получаем некоторую вероятностную меру, которая называется инвариантной мерой некоторой динамической системой. Будем обозначать ее буквой  $\mu$ . Такая инвариантная мера для хаотических систем будет сингулярной, не непрерывной, не дискретной, и не их комбинацией. Но все еще будет вероятностной мерой. Более того, можно показать, что она существует для любой системы, в частности для любой хаотической системы. Последнее утверждение носит названия теоремы Крылова-Боголюбова.

Раз у нас есть вероятностная мера (не связана с теорией вероятности, но интеграл по области равен единице, более того, это мера является единственной подлинной характеристикой такой системы), значит мы можем вычислить некоторые привычные нам характеристики этой меры.

Первой характеристикой является энтропия динамической системы, или энтропия Колмогорова-Синая.

Давайте рассмотрим фазовое пространство нашей динамической системы и разобьем его на непересекающиеся подмножества  $A_1, A_2, \dots, A_n$  и обозначим их совокупности  $A_{i_1}$ . Теперь рассмотрим множество с двумя индексами

$$A_{i_1 i_2} = A_{i_1} \cap f^{-1}(A_{i_2})$$

Где  $x_{i+1} = f(x_i)$ ,  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ .

По индукции строим множество

$$A_{i_1, \dots, i_k} = A_{i_1} \cap f^{-1}(A_{i_2}) \cap \dots \cap f^{-k+1}(A_{i_k})$$

Рассмотрим следующее выражение:

$$H_k = \sum_{i_1, \dots, i_k} \mu(A_{i_1, \dots, i_k}) \ln \mu(A_{i_1, \dots, i_k})$$

Тогда энтропия Колмогорова-Синия определяется как:

$$KS = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lim_{k \rightarrow +\infty} [H_{k+1} - H_k] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lim_{k \rightarrow +\infty} H_k/k$$

Для хаотических систем  $KS > 0$ .

Для регулярных систем  $KS = 0$ .

По сути это та скорость, с которой растет информация.

**Прогнозирование за горизонтами прогнозирования.** Рассмотрим временной ряд  $y_1, \dots, y_n \in \mathbb{R}^n$  и поставим цель решить для него задачу прогнозирования, которая формулируется следующим образом:

$$M[y_{t+k} - \hat{y}_{t+k}]^2 \rightarrow \min$$

и разобьем его на отрезки длины  $s$ . В теории их называют z-вектора, а на жаргоне – чанки (chunks).  $s$  – достаточно небольшая величина.

$$z_0 = (y_0, y_1, \dots, y_{s-1})$$

$$z_1 = (y_1, y_2, \dots, y_s)$$

$$z_s = (y_i, y_{i+1}, \dots, y_{i+s-1})$$

Длина этого вектора – фундаментальная характеристика. Сделаем отступление и поговорим про теорему Такенса (Takens), или основная теорема теории прогнозирования. Мы сказали, что наблюдаемая динамика является траекторией некоторого неизвестного ОДУ  $\dot{x} = f(x)$ . ..... траектории этой системы движутся в окрестности некоторого аттрактора, геометрического центра точек. Поскольку сам объект сложный, мы получаем сложную систему. Называются они странные аттракторы, некоторая фрактальная система.

Пусть у нас есть размерность аттрактора  $n$ , тогда мы можем вложить такую траекторию только в объекты размерности  $d \geq 2n + 1$ . Это теорема Уитни (Whitney). ...

Таккенс дал ответ на этот вопрос. Если мы от рассмотрения временного ряда перейдем к рассмотрению пространства  $z$ -векторов, то выбирая размерность  $z$ -векторов достаточно большим, мы можем добиться того, чтобы у нас ... взаимнооднозначное между и динамикой  $z$ -векторов, которая нам прекрасно известна.

Пусть есть многообразие  $M^n$ , по которому протекает движение истинной системы, которую мы не знаем.

*Замечание.* Вообще говоря странные аттракторы хаотических систем не являются многообразиями даже локально. Но мы можем считать что  $M^n$  является минимальным иннерционным многообразием, проще говоря, минимальным многообразием, который объемлет странный аттрактор. Можем считать для простоты, что мы работаем именно с многообразием.

Пусть есть так же отображение  $h : M^n \rightarrow \mathbb{R}^d$ , будем называть его наблюдаемой.... Тогда теорема Таккенса формулируется следующим образом: Если:

- 1) многообразие  $M^n$  и отображение  $h$  являются как минимум дважды дифференцируемыми
- 2)  $h(M^n)$  является диффеоморфизмом, взаимно непрерывным и взаимно дифференцируемым отображением
- 3) выполнены условия теоремы Уитни  $d \geq 2n + 1$ , то есть с топологической точки зрения  $h$  является вложением в ...
- 4) некоторые технические условия

Тогда существует взаимнооднозначное отображение между динамикой истинной системой и динамикой в пространстве  $z$ -векторов.

Пусть есть набор  $d$ -мерных точек. Пусть  $\tau$  — физическое время, которое протекает между нашими наблюдениями. Соответственно, в силу того, что  $h$  является диффеоморфизмом, отображение  $h^{-1}$  отобразит точку этого ряда в точку на неизвестной нам траектории. Обозначим координату  $z_i$  как  $x_i$ . Обозначим .... как  $g^\tau$ , тогда  $x_{i+1} = q^2 x_i \xrightarrow{h} z_{i+1}$ , то есть получаем сдвиг временного ряда на  $\tau$ .

.....

Опишем все сказанное математически.

$$z_{i+1} = h(g^T(h^{-1}(z_i)))$$

Обозначим такое сквозное отображение как  $\Lambda(z_i)$ . Согласно теореме Таккенса такое отображение является дифференцируемым.

$\Lambda : z_i \rightarrow z_{i+1}$ , хотим оставить только одну компоненту.

$y_{i+1} = \zeta_n(y_i, y_{i-1}, \dots, y_{i-d+1})$ . Выходим, мы можем прогнозировать. ....



## Лекция 16. Прогнозирование за горизонтом прогнозирования

Для того чтобы преодолеть фундаментальный закон, который не позволяет нам прогнозировать за горизонтом прогнозирования было предложено несколько концепций, которые в совокупности дают необходимый эффект.

Давайте отметим, что эти концепции сочетаются с любым методом прогнозирования, с любым подходом к прогнозированию, однако излагать их мы будем на основании так называемого прогнозирования на основе кластеризации (Predictive clustering). Подход был предложен в 90-е годы прошлого века и показал свою работоспособность в сравнении со всеми остальными методами, подходами, при прогнозировании хаотических временных рядов на много шагов вперед. Метод базируется на предположении, что для рассматриваемого временного ряда все переходные процессы завершены. И движение происходит в окрестности аттрактора. Поскольку ряд хаотический, то аттрактор странный.

Что такое переходные процессы? В теории прогнозирования и в теории динамических систем, вообще все наблюдаемые на земле процессы делятся на две категории: переходные и установившиеся. Установившиеся процессы означают, что движение системы протекает в окрестности некоторого аттрактора, не обязательно странного. И соответственно сложность прогноза определяется именно сложностью этого аттрактора как геометрического объекта. Переходные процессы означают, что движение протекает вне окрестности любого аттрактора системы, что система еще не успела притянуться ни к одному из своих аттракторов, что система находится на пути к установившемуся процессу. Или на пути между двумя установившимися процессами. В последнем случае говорят о жесткой бифуркации или о катастрофе системы. Естественно, в реальных системах переходные процессы кратковременны, а установившиеся процессы долговременны. Поэтому разумно пренебрегать переходными процессами, что мы и сделаем. Разумно считать, что они завершены и мы движемся в окрестности некоторого аттрактора, в нашем случае странного.

Если это так, то мы в наших дальнейших рассуждениях можем опереться на теорему Пуанкаре (Poincaré) о возвращении траектории. Теорема гласит следующее: для всякой динамической системы, определяемой своим потоком  $g^T$ , и для всякой точки  $x$  ее инвариантного множества, существует момент времени  $T$ , что  $g^T(x)$ , то есть точка, в которой окажется  $x$  через время  $T$ , принадлежит окрестности точки  $x$ , сколь бы мала не была эта окрестность.

$$g^T(x) \in U(x)$$

Соответственно, это означает, что любая траектория любой системы, отвечающая установившемуся процессу, рано или поздно вернется в окрестность самой себя. Пройдет рядом с той точкой, через которую она уже проходила, причем «рядом» может означать любое весьма малое расстояние  $\varepsilon > 0$ . При этом для регулярных траекторий это обычно совпадение. А для хаотических траекторий доказано прямо противоположное. Траектория никогда дважды не пройдет через ту же самую точку, сколько малой бы не был  $\varepsilon$ . Но по теореме Пуан-Каре она пройдет через  $\varepsilon$  — окрестность точки  $x$ . При этом время  $T$  нам неизвестно, Пуан-Каре доказал лишь его существование. В подавляющем большинстве практически значимых случаев, его и рассчитать толком нельзя.

Например, на ряде Лоренса (стандартный бенчмарк всех моделей прогнозирования хаотических рядов), показано, что  $T$  равномерно распределенная случайная величина. Однако это не отменяет самого факта возвращения.

На этот факт мы и опоемся.

Что с нашей точки зрения говорит теорема Пуан-Каре? Если мы рассмотрим хаотическую систему и установившийся процесс, то любой участок ряда отвечает движению по некоторой области странного аттрактора.

Если мы от геометрического представления в фазовом пространстве перейдем к динамическому представлению в виде ряда, то мы получаем удивительную вещь: если кусок ряда встречался, то через какое-то  $T$  этот кусок повторится (не совсем он, но что-то отличное от него на  $\varepsilon$ ).

Вообще говоря, вероятность попадания траектории в один и тот же гиперкубик странного аттрактора равна инвариантной мере динамической системы, о которой мы говорили в прошлый раз. Для одних гиперкубиков эта вероятность больше, для других меньше. С практической точки зрения это означает, что если мы возьмем какой-то кусок (chunk) ряда, то в одних случаях он будет многократно повторяться (с точностью до  $\varepsilon$ ), а в других случаях он будет повторяться редко, возможно мы вообще не сможем увидеть некоторые куски ряда. Если мы имеем дело с бесконечным рядом, то теорема Пуан-Каре гарантирует нам, что мы для каждого кусочка найдем его соответствие. К счастью, мы имеем дело с конечным рядом, то, соответственно, некоторые чанки могут и не повториться. Тем ни менее, для достаточно большого ряда и для достаточно хорошей хаотической динамической системы, мы будем наблюдать повторяемость некоторых кусочков ряда.

Отсюда следует весьма любопытный вывод: если мы разрежем ряд на кусочки, то есть на наши  $z$ -вектора, то мы можем это множество векторов кластеризировать тем или иным образом, и эта операция кластеризации будет разумной. Кластера будут соответствовать областям странного аттрактора.

Центроиды таких класетров называются мотивами (motifs). Пусть наши  $z$ -вектора и наши мотивы имеют размерность  $l$ . Мы рассматриваем наш временной ряд и в какой-то момент наблюдения прекращены. Мы хотим получить прогноз для следующей точки этого временного ряда. Если мы возьмем участок временного ряда, предшествующий точке завершения наблюдений, длины  $l - 1$ , и сравним его с каждым из мотивов, обрезанных на единичку, то если окажется, что этот наблюдаемый вектор  $z^*$  близок к какому-то из обрезанных мотивов:

$$\rho(z^*, \text{Trunc } \xi_e) < \varepsilon$$

То, соответственно, мы можем в качестве прогноза выбрать последний элемент этого обрезанного мотива. Среди множества всех существующих мотивов совсем необязательно выбирать один единственный (например, ближайший) мотив. Может оказаться, что на расстоянии, не превышающем  $\varepsilon$ , у нас окажется несколько, и даже достаточно много обрезанных мотивов. Это позволяет нам получить для нашей точки не один прогноз  $\hat{y}_{t+1}$ , но целое множество, которое носит название множества возможных прогнозных значений. Обозначается  $\hat{S}(y_{t+1})$ . Вообще говоря, это неплохой результат по двум причинам:

В теории, где получить даже одно прогнозное значение тяжело, получить целое множество – вещь хорошая. Хотя множество прогнозных значений может быть пустым. Оно существует, но не факт, что мы их найдем в конечном рядк.

Если у нас есть несколько оценок одной и той же величины, то это всегда хорошо со статистической точки зрения, можно их, например, усреднить, и получить более хорошую в каком-то смысле величину, чем каждая из исходных оценок.

У этого подхода есть три недостатка:

1. Структура множества прогнозных значений не будет тривиальной, как нам бы хотелось.
2. Множество  $z$ -векторов необходимо кластеризировать. Это означает, что мы должны подобрать эффективный алгоритм кластеризации. В зависимости от данных, от структуры, сложности, кластеризируемости данных, мы должны применять различные алгоритмы кластеризации, которых придумано огромное множество.
3. Многомерность данных.

Алгоритмов кластеризации существует огромное множество. Откуда такое многообразие? Зачем столько разных алгоритмов? Ответ прост, ни в каком разделе прикладной математики не существует всегда работающего решения. В зависимости от данных, их структуры, сложности, кластеризованности, мы должны применять различные алгоритмы кластеризации. Наша специальность заключается в том, что мы должны понимать, какова структура данных, и какие методы, алгоритмы можно применить к этим данным. У каждой задачи есть множество подходов к решению. Есть постановка задачи, а есть методы решения. Специалист должен жестко разделять постановку задачи, и методы ее решения. И ни для одной задачи не существует идеального решения. Это связано тем, что для данного типа задач, для данного типа данных, для особенностей данной задачи, которые методы оказываются крайне неэффективными, или вовсе нерабочими.

Что касается задач кластеризации, какие есть проблемы?

K-means предполагает, что мы знаем количество кластеров. А вот наше пространство  $z$ -векторов, допустим, 20-мерное. Можем ли мы, смотря на 20-мерное пространство сказать, сколько там кластеров? Причем даже идея с перебором количества работает плохо. Во-первых, объем данных очень большой, такое просто вычислительно невозможно. Во-вторых, увидеть получившиеся кластера мы не можем, только посчитать какую-то меру кластеризации. И разные меры будут давать разные значения гиперпараметров алгоритма. И понять, где истина, довольно трудно. Было бы неплохо, чтобы число кластеров вычислялось в процессе кластеризации.

Этот момент важен с дидактической точки зрения. Теорема Пуанкаре гарантирует наличие кластерной структуры, но количество кластеров неизвестно. Наша задача – сформулировать требования к алгоритму кластеризации и найти подходящий метод. Если готовый алгоритм не удовлетворяет требованиям, придётся разрабатывать собственный. Надеяться на стандартные решения из библиотек без анализа задачи бесполезно. Наша цель — научиться осознанно формулировать требования и подбирать / создавать подходящие алгоритмы.

Когда мы говорим о K-means и про кластера, мы как-то внутренне предполагаем, что кластера – это какие-то сферообразные кусочки, отделенные в пространстве друг от друга. Но в природе такого не встречается и кластера бывают самые разные. Мало того, что они вряд ли будут линейно делимы, так еще и могут иметь странные, например вытянутые, формы. Кластером может быть практически что угодно. Кластера могут быть разномерными.

В любой алгоритм кластеризации неявно заложено представление алгоритма о кластерах. В задачах predictive clustering мы встречаемся с различными кластерами, далеко не шарообразными. Отсюда вытекает следующее требование: Алгоритм кластеризации должен уметь работать с кластерами разных типов. Он должен быть заточен под весьма большой диапазон различных кластеров.

В итоге получаем два довольно строгих требования.

## Лекция 17. Методы кластеризации.

Прежде всего обратимся к описанию алгоритма кластеризации  $z$ -векторов. На прошлой лекции мы сформулировали, что это должен быть не просто алгоритм кластеризации, но алгоритм, удовлетворяющий определенным требованиям:

1. Число кластеров априори неизвестно и должно определяться в процессе алгоритма кластеризации.
2. Форма кластера априори неизвестна, и алгоритм должен быть способен выделять кластера самой различной формы, потому что в данных, порождаемых прогнозированием на основе кластеризации, мы можем в одной кластеризации встретить кластера весьма различных, прихотливых форм.
3. Размерность кластеризируемых данных может быть если и не совсем большой, но во всяком случае больше трех. Размерность выборки, число векторов, подлежащих кластеризации, может быть очень объемным.

Соответственно, среди гигантского множества алгоритмов кластеризации, найдется мало алгоритмов, подходящих нашим требованиям.

Рассмотрим один из них: алгоритм Уишарта (Wishart). Алгоритм Уишарта принадлежит одновременно двум классам алгоритмов кластеризации. Во-первых: это кластеризация на основе функции плотности (density-based clustering). Во-вторых: это кластеризация на основе графов (graph-based clustering). Соответственно, позволяет сочетать достоинства обоих классов кластеризации. А именно:

Алгоритмы на основе плотности обычно позволяют определять число кластеров в процессе кластеризации. А вот алгоритмы на основе графов позволяют работать с кластерами любой формы. Сочетание этих двух подходов позволяет удовлетворить двум нашим главным требованиям.

Пусть мы имеем выборку  $\{X_i\}_{i=0}^n, X_i \in \mathbb{R}^s$

Мы хотим построить четкую кластеризацию, то есть, мы хотим разбить множество  $\{X_i\}_{i=0}^n$  на не пересекающиеся множества  $c_i$ . .....

Обычно к этой постановке добавляют некую меру качества кластеризации – некий функционал  $f : \{c_i\} \rightarrow [0, 1]$ , которые тем выше (тем ниже), чем больше значение функции  $f$  на данной кластеризации.

В чем заключаются алгоритмы кластеризации на основе плотности? **рисунок**

У алгоритма Уишарта немного другой подход к определению кластера, но в целом повторяется идея с поиском ....

Алгоритмы на основе графов заключаются в построении некоего специфического графа, который носит название графа данных (data graph, proximity graph). Вершины этого графа соответствуют всем точкам выборки, а ребра этого взвешенного графа соединяют те вершины, которые близки друг к другу. Понятие близости можно определять по-разному. Типов этих графов данных существует около двух десятков. Если граф данных взвешенный, то вес обычно является расстоянием между вершинами.

#### Алгоритм Уишарта

0) Для каждой точки выборки  $X_i$  считаем расстояние до  $k$ -го ближайшего соседа  $\rho_{k(x_i)}$  и считаем объем шара  $v_{k(x_i)}$  с центром в точке  $x_i$  и радиусом, равным  $\rho_{k(x_i)}$ . После чего мы считаем значимость наблюдения  $x_i$  как  $p_k(x_i) = \frac{k}{W v_{k(x_i)}}$ . После этого идет сортировка  $x_i$  по убыванию их значимости, либо по возрастанию объема  $v_{k(x_i)}$ . Это два достаточно времяемких действия, но существуют алгоритмы быстрого поиска этих статистик.

Последующие шаги стартуют с первых из отсортированных точек. Что такое точка с наибольшей значимостью? Это те точки, для которых  $k$ -ближайшие находятся близко. Такие точки принадлежат областям сгущения. Если мы стартуем с таких точек, это будет означать, что мы стартуем с самых центров будущих кластеров.

Мы предполагаем, что на  $i$ -ом шаге алгоритма строится некоторый частичный подграф графа данных  $G_i$ , предполагаем, что на  $i$ -ом шаге этому подграфу принадлежат первые  $i$  точек нашей отсортированной выборки наблюдений. При этом установлены все необходимые ребра и необходимые вершины, и отнесены к тому или иному классу.

Факт отнесенности к классу мы будем обозначать как  $w(x_i) = l \geq 0$ . Если  $l \geq 0$ , то  $l$  — номер класса. Если  $l = 0$ , это означает, что  $i$ -е наблюдение принадлежит межкластерному шуму.

$i + 1$ ) Прибавляем к нашему графу вершину, которая относится к наблюдению  $X_i$ , и посмотрим на  $c(x_{i+1}) : \{x_j \in V_i : \rho(x_j, x_{i+1}) \leq \rho_k(x_j)\}$ , то есть, множество всех вершин, которые уже принадлежат к  $G_i$ , кроме того наш новый элемент  $X_i$  принадлежит их  $k$ -ближайшим соседям.

1)  $c(x_{i+1}) = \emptyset$ . В этой ситуации мы создаем новый кластер и добавляем наблюдение  $x_i$ , увеличиваем счетчик кластеров на единицу.

2)  $c(x_{i+1})$  состоит из элементов одного и того же кластера,  $w(x_j \in c(x_{i+1})) = l$ , и этот кластер не сформирован, тогда мы относим  $X_{i+1}$  к этому классу. Если же кластер уже сформирован (его создание завершено и мы более не можем относить к нему другие элементы), тогда мы относим наблюдение  $x_{i+1}$  к межкластерному шуму.

3)  $c(x_{i+1}) \neq \emptyset$ , более того, в нем есть точки, относящиеся к разным кластерам, тогда каждый из кластеров проверяется на значимость, то есть мы считаем  $\max_{x_i, x_j \in c} |p_k(x_i) - p_k(x_j)|$  и сравниваем с  $h$ . Если максимум меньше, чем  $h$ , то кластер не значимый. Если больше, то значимый.

Пусть число значимых кластеров это  $z(h)$ . Если  $z(h) > 1$ , то мы объявляем все значимые кластера сформированными. Элементы всех незначимых кластеров относим к межкластерному шуму. Более того, саму точку  $X_{i+1}$  тоже относим к межкластерному шуму. Иначе пусть  $z(h) = 1, l_1 \neq 0$  (где  $l_i$  отсортированы  $l_1 < l_2 < \dots < l_m$ ). Тогда мы оставляем только один значимый кластер, вливаем в него все незначимые кластера, тем самым ликвидируя их, и относим к значимому кластеру значение  $X_{i+1}$ .

Итерация по шагам алгоритма продолжается до тех пор, пока мы не исчерпаем все точки выборки, то есть, не осуществим кластеризацию. При том алгоритме, который сформулирован, каждая точка будет отнесена к тому или иному кластеру. Обычно после завершения шагов алгоритма, кластера, размер которых меньше какого-то заданного алгоритма, мы относим эти точки в межкластерный шум.

Достоинства и недостатки:

Достоинства очевидны: определение числа кластеров в автоматическом режиме, работа с кластерами любого типа.

Недостатки:

1. Временной алгоритм для больших выборок.
2. Алгоритм зависит от двух параметров, и качество результата работы алгоритма зависит от обоих параметров. Обычно их порядок достаточно понятен, но, тем ни менее, .....

У этого алгоритма есть и другие достоинства, кроме определения числа кластеров.



Такой подход к пониманию кластера обычно приводит к тому, что на реальных данных значительная часть данных (70-80-90%) относится к межкластерному шуму. Кластера получаются маленькими и компактными. На практике в следствие этой особенности его любят сочетать с другими алгоритмами кластеризации (например, определить число кластеров и запустить к-средних). Мы не решаем задачу кластеризации, мы решаем задачу прогнозирования, и в этом смысле оказывается, что алгоритм Уишарта действительно находит мотивы.

Возвращаемся к прогнозированию на основе кластеризации. Мы хотим добиться того, чтобы с ростом числа шагов вперед, на которое мы хотим получить прогноз, ошибка прогнозирования не росла экспоненциально, как предполагает первый закон Ляпунова. С этой целью было предложено несколько идей.

Первая идея заключается в так называемых шаблонах. Теорема Таккенса нам говорит о том, что число элементов в  $z$ -векторе должно быть больше некоторого числа, целой части округления вверх  $2d + 1$ , где  $d$  — размерность некоторого геометрического объекта, странного аттрактора, который этот ряд породил. Но теорема Таккенса не говорит нам, каким образом эти вектора должны быть сформированы. В классическом варианте они формируются просто из последовательных наблюдений. Было предложено формировать вектора не только из последовательных, но и .....

Представим «гребешок» с некоторыми выломанными зубьями, допустим, между зубьями расстояния  $k_1, \dots, k_l$ . Прикладываем его к нашему ряду, тогда под зубьями будут некоторые наблюдения, то есть наблюдения  $y_0, y_{k_1+0}, y_{k_1+k_2+0}, \dots, y_{k_1+\dots+k_l+0}$ .

Получаем  $z$ -вектора путем сдвига такого «гребешка» от начала к концу. Для каждого шаблона вида  $k_1, \dots, k_l$  получаем выборку, выполняем кластеризацию и получаем для каждого шаблона свой набор мотивов.

Для каждой точки, значение в которой мы хотим спрогнозировать, мы берем все шаблоны, которые у нас есть, и прикладываем все шаблоны так, чтобы последний элемент был точкой, значение которой мы хотим спрогнозировать, а остальные «зубья» стояли в точках, для которых значение известно, либо в точках, значения которых мы уже спрогнозировали.

Мы формируем вектор наблюдений из тех точек, которые нам известны, и сравниваем этот вектор наблюдений  $z^*$  с обрезанными шаблонами:

$$z_{i(\alpha)} : \rho(z^*, \text{Trunc } z_{i(\alpha)}) < \varepsilon$$

Получаем снова вектор прогнозов. Однако этой идеи с шаблонами оказалось недостаточно. На следующей лекции обсудим, чем дополнить данный метод.