

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова



Факультет Вычислительной Математики и Кибернетики

Кафедра Математических Методов Прогнозирования

**«Сравнение скорости вычисления собственных значений  
положительно определённых матриц»**

Выполнил:

студент 1 курса магистратуры 517 группы

*Королев Николай Сергеевич*

Преподаватель:

канд. техн. наук, доцент

*Русол Андрей Владимирович*

# Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>3</b>
1.1	Постановка задачи . . . . .	3
1.2	Теоретическая часть . . . . .	3
1.3	Существующие методы . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Ансамбль промежуточных решений</b>	<b>5</b>
2.1	Поиск промежуточных решений . . . . .	5
2.2	Поиск функции-ансамбля . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Вычислительные эксперименты</b>	<b>6</b>
3.1	Результаты эксперимента . . . . .	7
3.2	Анализ полученных результатов . . . . .	7
<b>4</b>	<b>Заключение</b>	<b>7</b>
	<b>Список литературы</b>	<b>9</b>

## **Аннотация**

В данной работе рассматривается новый метод повышения качества обучения моделей, а также увеличения их обобщающей способности, основанный на ансамбле промежуточных решений. В ходе вычислительного эксперимента, была показана возможная применимость данного метода для улучшения качества нейронных сетей, решающих задачу классификации на реальных данных.

# 1 Введение

В настоящее время придумано огромное количество алгоритмов машинного обучения. Данные алгоритмы решают различные задачи и применяются во многих сферах человеческой деятельности. Одной из наиболее распространённых способов применения машинного обучения является решение задачи предсказания, в которой необходимо предсказать некоторый параметр (отклик) по ряду других параметров. В таких задачах крайне важна обобщающая способность используемого алгоритма обучения. В случае недостаточной обобщающей способности, итоговая модель не сможет достаточно точно предсказывать необходимый параметр (отклик), поэтому очень остро стоит проблема повышения обобщающей способности модели.

В данной работе рассматривается новый метод повышения качества обучения моделей, а также увеличения их обобщающей способности, основанный на ансамбле промежуточных решений. Кроме того, проводятся вычислительные эксперименты, показывающие эффективность работы данного метода в задаче классификации на данных систолического артериального давления.

## 1.1 Постановка задачи

$x_1, x_2, \dots, x_N$  – точки в некотором векторном пространстве;  $y_1, y_2, \dots, y_N$  – значения, соответствующие этим точкам. При этом  $y_i = y(x_i) = f(x_i) + \varepsilon$ , где  $\varepsilon$  – случайная величина с нулевым математическим ожиданием и дисперсией  $\sigma^2$ . Пусть также задана функция  $\hat{f}_1(x)$ , которая приближает функцию  $f(x)$ . Стоит задача нахождения  $M - 1$  функции  $\hat{f}_2(x), \hat{f}_3(x), \dots, \hat{f}_M(x)$ , а также функции-ансамбля  $\hat{f}(x) = a(\hat{f}_1(x), \hat{f}_2(x), \dots, \hat{f}_M(x))$ , приближающей функцию  $f(x)$  лучше чем любая из функций  $\hat{f}_i(x)$ ,  $i = 1, 2, \dots, M$ .

## 1.2 Теоретическая часть

Из [3] известно разложение математического ожидания квадратичной ошибки на смещение и дисперсию:

$$\mathbb{E} \left[ \left( \hat{f}(x) - y \right)^2 \right] = \left( \mathbb{E} \hat{f}(x) - f(x) \right)^2 + \left( \mathbb{E} \hat{f}^2(x) - \left( \mathbb{E} \hat{f}(x) \right)^2 \right) + \sigma^2$$

Для уменьшения как смещения, так и дисперсии  $\hat{f}(x)$  используются ансамбли:

$$\hat{f}(x) = a(\hat{f}_1(x), \hat{f}_2(x), \dots, \hat{f}_M(x))$$

В [1] было доказано, что в случае, когда функция  $a(\hat{f}_1(x), \hat{f}_2(x), \dots, \hat{f}_M(x))$  является выпуклой комбинацией своих аргументов:

$$a(\hat{f}_1(x), \hat{f}_2(x), \dots, \hat{f}_M(x)) = \sum_{i=1}^M c_i \hat{f}_i(x),$$

$$\sum_{i=1}^M c_i = 1; \quad c_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, M;$$

выполнено

$$\mathbb{E} \left[ \left( \hat{f}(x) - y \right)^2 \right] = \sum_{i=1}^M c_i \mathbb{E} \left[ \left( \hat{f}_i(x) - y \right)^2 \right] - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j \mathbb{E} \left[ \left( \hat{f}_i(x) - \hat{f}_j(x) \right)^2 \right] \quad (1)$$

Соответственно, для уменьшения среднеквадратичной ошибки необходимо уменьшать среднеквадратичную ошибку каждого предиктора  $\hat{f}_i(x)$ , а также увеличивать расхождение между прогнозами различных предикторов.

### 1.3 Существующие методы

В большинстве случаев функция-ансамбль  $\hat{f}(x) = a(\hat{f}_1(x), \hat{f}_2(x), \dots, \hat{f}_M(x))$  является линейной комбинацией функций предикторов  $\hat{f}_1(x), \hat{f}_2(x), \dots, \hat{f}_M(x)$ . Коэффициенты линейной комбинации ищутся при помощи методов регрессионного анализа:

- гребневая регрессия [4]
- метод Лассо [5]
- эластичная сеть [6]
- регрессионная модель, отбирающая признаки, наиболее коррелирующие с откликом [2]

Функции  $\hat{f}_1(x), \hat{f}_2(x), \dots, \hat{f}_M(x)$  в таких случаях обычно независимы друг от друга и получены методом оптимизации некоторого функционала.

## 2 Ансамбль промежуточных решений

Пусть:

$X$  - матрица из  $N$  строк,  $i$ -ая строка равна  $x_i$ ;

$Y$  - вектор из  $N$  элементов,  $i$ -ый элемент равен  $y_i$ .

Пусть  $\hat{f}_1(x)$  представима в виде функции с параметрами  $\tilde{f}(x, \theta)$  и была получена некоторым методом оптимизации функционала среднеквадратичной ошибки  $MSE(\hat{f}_1(x), X, Y) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{f}_1(x_i) - y_i)^2$ :

$$\hat{f}_1(x) = \tilde{f}(x, \theta_1)$$

В качестве функции  $\tilde{f}(x, \theta)$  может выступать нейронная сеть, тогда параметрами  $\theta$  будут являться веса нейронной сети.

### 2.1 Поиск промежуточных решений

Будем искать функции  $\hat{f}_2(x), \hat{f}_3(x), \dots, \hat{f}_M(x)$  в виде  $\tilde{f}(x, \theta)$ , минимизируя следующий функционал:

$$\mathcal{L}(\hat{f}_k(x), X, Y) = MSE(\tilde{f}(x, \theta_k), X, Y) - \frac{\alpha}{k-1} \sum_{i=1}^{k-1} \|\theta_k - \theta_i\|^2, \quad k = 2, 3, \dots, M, \quad (2)$$

где  $\alpha \geq 0$  является гиперпараметром.

Данный функционал поощряет функции  $\hat{f}_i(x)$  иметь различные параметры  $\theta_i$ . Таким образом, мы пытаемся добиться максимального расхождения значений функций. Впоследствии это уменьшит среднеквадратичную ошибку функции-ансамбля  $\hat{f}(x)$ , что следует из уравнения (1).

Стоит отметить, что при больших  $k$  вычисление данного функционала может быть вычислительно затратным, так как  $\sum_{i=1}^{k-1} \|\theta_k - \theta_i\|^2$  в общем случае требует  $O(k)$  времени. Если все  $\theta_i$  лежат в некотором евклидовом пространстве, данное выражение переписывается в виде:

$$\sum_{i=1}^{k-1} \|\theta_k - \theta_i\|^2 = (k-1) \|\theta_k\|^2 - 2\langle \theta_k, \sum_{i=1}^{k-1} \theta_i \rangle + \sum_{i=1}^{k-1} \|\theta_i\|^2.$$

Значения выражений  $\sum_{i=1}^{k-1} \theta_i$  и  $\sum_{i=1}^{k-1} \|\theta_i\|^2$  можно поддерживать в течении всего процесса поиска функции  $\hat{f}_k(x)$  и пересчитывать за  $O(1)$  времени при переходе к поиску  $\hat{f}_{k+1}(x)$ .

## 2.2 Поиск функции-ансамбля

Составим матрицу  $\hat{X}$  размера  $N \times M$ , где  $\hat{X}_{i,j} = \hat{f}_j(x_i)$ . Для поиска функции-ансамбля  $\hat{f}(x) = a(\hat{f}_1(x), \hat{f}_2(x), \dots, \hat{f}_M(x))$  необходимо найти функцию  $a(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_M) = a(\hat{x})$ , которую будем искать из минимизации функционала  $MSE(a(\hat{x}), \hat{X}, Y)$ .

## 3 Вычислительные эксперименты

Для проверки качества работы представленного метода решим задачу классификации на трёх выборках данных систолического артериального давления. Данные заранее разбиты на обучающую и тестовую выборки. Размеры каждой из выборок представлены в таблице 1. Все параметры являются численными.

Номер выборки	Количество объектов		Количество параметров
	Обучающая выборка	Тестовая выборка	
1	718	458	114
2	373	221	114
3	832	495	114

Таблица 1: Размеры выборок данных

В качестве функции  $\tilde{f}(x, \theta)$  используется двухслойная нейронная сеть с сигмоидальной функцией активации, которая оптимизируется методом Adam. В качестве функции-ансамбля  $a(\hat{x})$  используется точно такая же нейронная сеть, с другим количеством входных параметров и другой размерностью скрытого слоя.

В ходе эксперимента изначально обучается одна нейронная сеть  $\hat{f}_1(x) = \tilde{f}(x, \theta_1)$  и оценивается качество её работы. После этого обучается  $M$  новых нейронных сетей  $\hat{f}_i(x) = \tilde{f}_i(x, \theta_i)$ , а также ищется оптимальная функция-ансамбль  $a(\hat{x})$  в виде двухслойной нейронной сети. Затем оценивается качество работы ансамбля промежуточных решений  $\hat{f}(x) = a(\hat{f}_1(x), \hat{f}_2(x), \dots, \hat{f}_M(x))$ .

### 3.1 Результаты эксперимента

Наилучших результатов удалось достичь для  $M = 4$ . Также при построении ансамбля промежуточных решений был замечен эффект улучшения качества предсказания отдельных нейронных сетей, обученных после первой нейронной сети  $\hat{f}_1(x)$ . Итоговые результаты эксперимента представлены в таблице 2.

Номер выборки	Одна нейронная сеть	Ансамбль промежуточных решений
1	0.78	0.86
2	0.79	0.83
3	0.78	0.81

Таблица 2: Результаты экспериментов (ROC AUC на тестовой выборке)

### 3.2 Анализ полученных результатов

Полученные результаты показывают, что ансамбль промежуточных решений, построенных с использованием функции потерь (2), способен достаточно серьёзно увеличивать обобщающую способность предсказания в сравнении с отдельными нейронными сетями. Также замечен эффект улучшения качества отдельных нейронных сетей, построенных данным методом. Попробуем объяснить данный эффект. Предполагается, что он вызван тем, что в случае нахождения недостаточно минимизирующего параметра  $\theta_1$  для нейронной сети  $\hat{f}_1(x, \theta_1)$ , последующие нейронные сети находят параметры  $\theta_i$  на отдалении от  $\theta_1$ . Следовательно,  $\theta_i$  не находится в области  $\theta_1$ , в которой функция потерь не достигает своего минимального значения.

## 4 Заключение

В процессе выполнения работы были получены следующие результаты:

- Был разработан метод повышения эффективности обучения, основанный на ансамбле промежуточных решений.



- Были проведены вычислительные эксперименты, которые показали возможную применимость данного метода для улучшения качества нейронных сетей, решающих задачу классификации на реальных данных.
- В ходе выполнения эксперимента было замечено улучшения качества работы отдельных нейронных сетей.