

Анализ свойств ансамбля локально аппроксимирующих моделей

Исламов Рустем Ильфакевич

Московский физико-технический институт

Консультант: Грабовой А. В.

Эксперт: Стрижов В. В.

30 апреля 2020 г.

Задача

Аппроксимация выборки, порожденной несколькими источниками.

Предлагаемое решение

Построение универсальной модели в виде ансамбля локальных моделей.

Требования к универсальному аппроксиматору

- Локальные модели должны быть простыми.
- Локальные модели должны аппроксимировать разные подмножества объектов, т. е. быть независимыми.

- ① *V. V. Strijov A. V. Grabovoy.* Prior distribution choices for a mixture of experts. Machine learning and data analysis, 2020.
- ② *Christopher M. Bishop.* Pattern Recognition and Machine Learning. SPRINGER NATURE, 2011.
- ③ *Павлов К.В.* Выбор многоуровневых моделей в задачах классификации, 2012.
- ④ *Esen Y.S., Wilson J., Gader P.D.* Twenty Years of Mixture of Experts. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems. 2012. Issues. 23. No 8. P. 1177-1193.

Постановка задачи построения ансамбля

Выборка

Матрица признаков $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times n}$ и выборка $\mathfrak{D} = \{(\mathbf{x}_i, y_i) : i \in \mathcal{I}\}$.

Гипотеза порождения данных

Выборка порождена K источниками. Это предположение индуцирует разбиение множества индексов \mathcal{I} на K непересекающихся подмножеств \mathcal{I}_k :

$$\mathcal{I} = \bigsqcup_{k=1}^K \mathcal{I}_k.$$

Разбиение \mathcal{I} индуцирует разбиение выборки данных \mathfrak{D} и множества объектов Ω :

$$\mathfrak{D} = \bigsqcup_{k=1}^K \mathfrak{D}_k, \quad \Omega = \bigsqcup_{k=1}^K \Omega_k.$$

Определение

Модель g_k называется локальной, если она аппроксимирует подвыборку

$$\mathfrak{D}_k = \{(\mathbf{x}_i, y_i) : i \in \mathcal{I}_k\}.$$

В данной работе каждая локальная модель является линейной. Локальные модели объединены в ансамбль локальных моделей.

Определение

Ансамбль локальных моделей — мультимодель, определяющая правдоподобие веса π_k каждой локальной модели g_k на признаковом описании объекта \mathbf{x} .

$$\mathbf{f} = \sum_{k=1}^K \pi_k g_k(\mathbf{x}, \mathbf{w}_k), \quad \pi_k(\mathbf{x}, \mathbf{V}) : \mathbb{R}^{n \times |\mathbf{V}|} \rightarrow [0, 1], \quad \sum_{k=1}^K \pi_k(\mathbf{x}, \mathbf{V}) = 1,$$

где \mathbf{f} — ансамбль локальных моделей, g_k — локальная модель, π_k — шлюзовая функция, \mathbf{V} — параметры шлюзовой функции.

Определение

Расстояние между локальными моделями равно выборочному коэффициенту корреляции Пирсона на выборке \mathbf{X} и вычисляется по формуле

$$\rho(g_i, g_j) = \frac{\sum_{l=1}^N (X_{il} - \bar{X}_i) (X_{jl} - \bar{X}_j)}{\sqrt{\sum_{l=1}^N (X_{il} - \bar{X}_i)^2 \sum_{l=1}^N (X_{jl} - \bar{X}_j)^2}},$$

$X_{il} = (\mathbf{X}\mathbf{w}_i)_l$, $X_{jl} = (\mathbf{X}\mathbf{w}_j)_l$, $\bar{X}_i = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N X_{il}$, $\bar{X}_j = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N X_{jl}$, $\mathbf{w}_i, \mathbf{w}_j$ — параметры локальных моделей g_i, g_j .

Цель введения расстояния

Локальные модели должны быть независимыми, расстояние между ними должно быть близко к нулю.

Цель базового эксперимента

Показать, что выборка, порожденная несколькими источниками, плохо аппроксимируется одной моделью.

Данные первого эксперимента

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_1 & 0 \\ 0 & x_2 \end{pmatrix}.$$

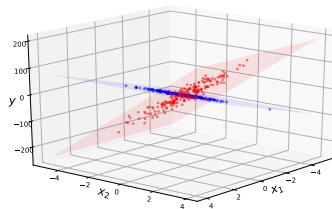
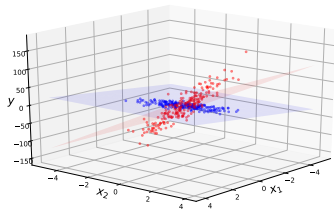
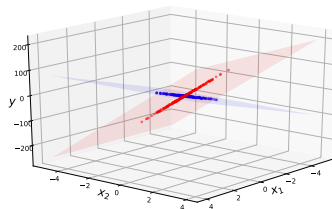
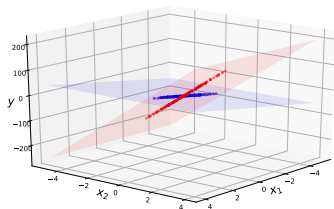
$$y_m = \alpha_m x_m + \varepsilon, \quad \varepsilon \in \mathcal{N}(0, 1).$$

Данные второго эксперимента

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_1 & \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 & x_2 \end{pmatrix}.$$

$$y_m = \alpha_m x_m + \varepsilon, \\ \varepsilon_{1,2} \in \mathcal{N}(0, 1), \quad \varepsilon \in \mathcal{N}(0, 1).$$

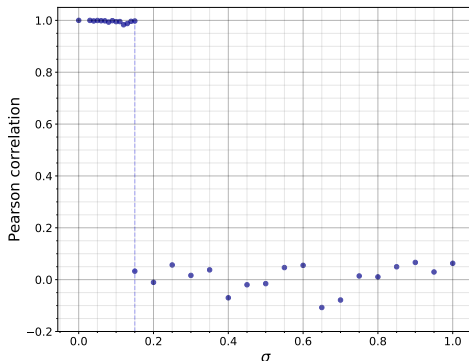
Результаты базового эксперимента



Ансамбль локальных моделей лучше аппроксимирует выборку, порожденную несколькими источниками.

Исследование расстояния между моделями на синтетической выборке

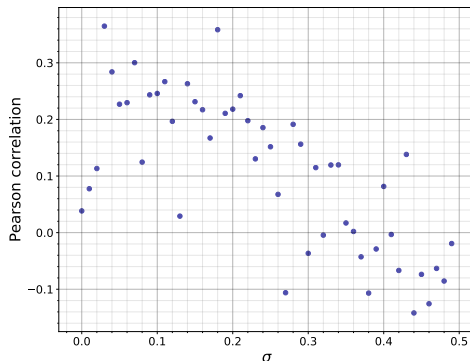
Выборка для эксперимента $\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$, $\hat{\mathbf{X}} = \begin{pmatrix} x_1 & \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 & x_2 \end{pmatrix}$, где $\varepsilon_1, \varepsilon_2 \in \mathcal{N}(0, \sigma)$.



При параметре шума σ меньшем порогового значения локальные модели практически одинаковы, при σ большем порога локальные модели независимы.

Исследование расстояния между моделями на реальных выборках

Выборка для эксперимента $\tilde{\mathbf{y}} = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_b \\ \mathbf{y}_s \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{673}$, $\tilde{\mathbf{X}} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_b \\ \mathbf{X}_s \mathcal{E} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{673 \times 13}$.



При увеличении параметра шума есть тенденция к уменьшению расстояния между локальными моделями, они становятся более независимыми.

Полученные результаты

- Качество аппроксимации выборки, порожденной несколькими источниками, при использовании ансамбля локальных моделей выше, чем у одной модели
- При увеличении параметра шума модели становятся независимыми

Дальнейшие исследования

- Исследование оптимального количества локальных моделей в ансамбле
- Использование расстояния между локальными моделями как регуляризатор