Эффективное применение гауссовских процессов к задаче классификации

Вайсер Кирилл Олегович

Московский физико-технический институт

Отчет о НИР/Группа 774, осень 2020
Научный руководитель: Панов М.Е.

Задача эффективного применения гауссовских процессов

Цель

Предложить быстрый и эффективный в терминах заданных критериев качества подход к использованию гауссовских процессов в задаче классификации.

Решаемая проблема

Вычисление параметров апостериорного распределения - долгая по времени операция. Кроме того, в явном виде оно не обладает свойством сопряженности.

Идея

Метод решения

Предлагаемый метод заключается в следующем:

1. Использовать аппроксимацию Лапласа для получения свойства сопряженности.
2. Использовать нейронную сеть для обучения ковариационной функции
3. Использовать методы эффективного сэмплирования для получения предсказаний.

Постановка задачи

1. выборка

$$\mathfrak{D} = \{\mathrm{x}_i, y_i\} \quad i = 1, \dots, m, \quad \mathrm{x}_i \in \mathbb{R}^m \quad y_i \in \{-1, 1\}$$

2. модель

$$\mathrm{g}(\mathrm{x}, \mathrm{w}) : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^h,$$

где $\mathrm{w} \in \mathbb{R}^n$ — пространство параметров модели.

3. априорное распределение гауссовского процесса

$$p(\mathrm{f}) \sim \mathcal{GP}(\boldsymbol{\mu}, K)$$

Постановка задачи

1. Факторизация
   Ковариационная функция факторизуется как
   $$k(x, x') = h(x)^\top h(x') + \sigma^2$$
   Модель обучается для получения факторизации h и представления ковариации как
   $$K = H^\top H + \sigma^2 I$$
2. Классификация
   Гауссовский процесс используется для получения латентных переменных f. После чего эти латентные переменные отображаются в отрезок $[0, 1]$ и используются для оценки вероятностей классов. Рассматривается преобразование
   $$p = \Phi\left(\frac{f}{1+\sigma^2}\right),$$
   где Φ - нормальная функция распределения.

Критерий качества:

1. Точность

$$A = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}[\hat{y}_i = y_i]$$

2. AUC score
3. Неопределенность

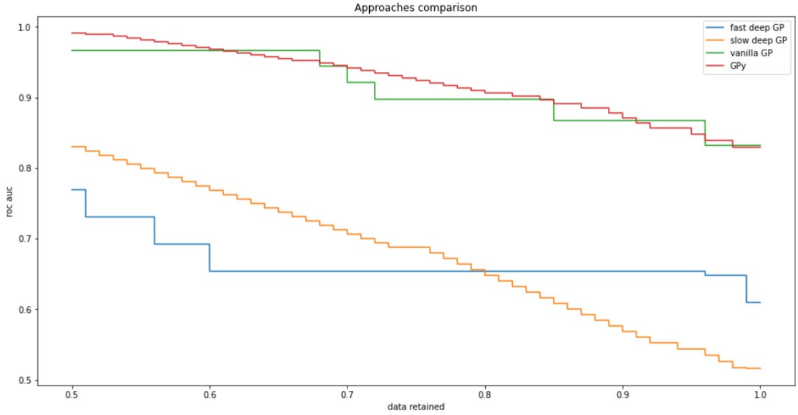
$$\mathcal{H}_{pred} = -\sum_{c=-1,1} p(y=c|x)\log p(y=c|x)$$

4. Скорость работы

Используемые подходы

1. Аппроксимация Лапласа
$$K_{post} = (K_{pr}^{-1} + \mathrm{W})^{-1},$$
где $\mathrm{W} = -\nabla^2 \log p(y|f)$
2. Факторизация ковариационной функции
$$K = H^\top H + \sigma^2 I$$
где G - выход сети.
3. Эффективное сэмплирование
Разреженное представление:
$$p(\boldsymbol{f}_* \mid \boldsymbol{y}) \approx \int_{\mathbb{R}^m} p(\boldsymbol{f}_* \mid \boldsymbol{u})\, q(\boldsymbol{u}) \mathrm{d}\boldsymbol{u}$$
Представление Фурье:
$$f(\cdot) = \sum_{i=1}^{l} w_i \phi_i(\cdot)$$

Текущие результаты



Текущие результаты

На данный момент предложенные модели проигрывают уже существующим по критерию AUC. Предлагается выяснить причину такого расхождения и устранить ее, если возможно.

Продолжение работы

1. Добиться улучшения результатов работы сети.
2. Реализовать эффективное сэмплирование
3. Исследовать подходы к поиску оптимальной подвыборки (BALD)