学习和解释经验数据中的复杂分布

Chengxi Zang*
CS Department, Tsinghua
University Beijing, China
chengxi.zang@gmail.com

Peng Cui CS Department, Tsinghua University Beijing, China cuip@tsinghua.edu.cn Wenwu Zhu CS Department, Tsinghua University Beijing, China wwzhu@tsinghua.edu.cn

摘要

为了适应经验数据分布,然后以生成方式解释它们,这是了解各种学科数据的结构和 动态的常见研究范式。但是,以前的工作主要是尝试以个案的方式拟合或解释经验数据分布。面对现实世界中复杂的数据分布,我们可以通过统一但简约的参数化模型来拟合和解释它们吗?

在本文中, 我们将复杂的经验数据视为 由动态系统生成,该系统将均匀随机性数据 作 为输入。通过对数据的生成动力学建模, 我们展示了一个四参数动态模型以及推理 和模拟 算法,它能够拟合并生成一系列分 布, 范围从高斯、指数、幂律、拉伸指数 (Weibull)),到具有多尺度复杂性的复杂变 体。我们的模型可以通过统一的微分方程来 解释,而不是黑盒子,它可以捕捉潜在的动 力学。我们的框架可以以原则的方式构建更 强 大的模型。我们通过各种合成数据集验 证我们的模型。然后我们应用我们的模型来 自不同 学科的 16 个真实数据集。我们展 示了通过最广泛使用来拟合这些数据集的 系统偏差方法,并显示我们的模型的优越性。 简而言之,我们的模型可能提供一个框架, 以便在经验数据 中拟合复杂的分布, 更重 要的是,了解它们的生成机制。

CCS 概念

计算数学→分布函数;集体过程; **网络→网络动态**;社交媒体网络;

关键词

复杂分布; 重尾分布; 生存分析; 动态模型; 解释性。

ACM 参考格式:

Chengxi Zang, Peng Cui, and Wenwu Zhu.

2018. Learning and Interpreting Complex
Distributions in Empirical Data. In

Proceedings of The 24th ACM SIGKDD

International Conference on Knowledge
Discovery & Data Mining (KDD '18). ACM,
New York, NY, USA, 10 pages.

https://doi.org/10.1145/3219819.3220073

1 引言

通过参数模型拟合经验数据分布,然后以生成方式解释它们是理解数据基础的结构和生成动力学的主要科学范例,其广泛用于各种领域,包括生物学[9],物理学[1,5],社会科学[12,15],计算机科学[8,32]等。例如,通过调查网络的幂律度分布[2],物理学家发现了网络演化随机网络中的动态。通过检查达尔文和爱因斯坦[18]或在线合作[30]的对应模式的响应时间分布,社会科学家试图揭示人类行为的决策动态。通过拟合高斯混合模型[19],贝叶斯方法[14],甚至深度生成模型[10]的数据分布,计算机科学家试图找到观察数据集的聚类结构和生成动力学。简而言之,这种科学范式适用于广泛的数据科学任务。

然而,以前的工作主要是试图以个案的方式拟合或解释复杂的经验数据。例如,高斯分布最广泛用于拟合窄尾数据分布。大量的文献试图通过幂律分布[5],威布尔分布(或拉伸的指数分布)[11]来模拟重尾数据,等等。特定混合模型也用于拟合复杂的多尺度分布[23,30,32]。像 GAN 这样的深度生成网络在拟合一维参数分布方面表现出有限的功效[24]。因此,我们是否可以拥有一个统一的模型来拟合和解释现实世界中各种复杂的数据分布?回答这个问题至关重

要。

在本文中,我们试图通过调查其生成动 态来拟合经验数据中的复杂分布。我们的模 型的直观显示如下: 我们将具有复杂分布的 经验数据视为从动态系统生成,其采用均匀 随机性作为输入。我们不是直接以个案的方 式对各种复杂的分布进行建模, 而是尝试对 其统一的、可能是简约的生成动态进行建模, 从而生成所有这些复杂的分布。表 1 显示 了一个例子: 不是通过四参数动态模型拟合 高斯,指数,幂律,拉伸指数,以及它们在 多尺度方案中具有复杂性的复杂变体,我们 可以捕获它们所有。我们的框架可以以原则 的方式构建更复杂的动态模型, 提供了有效 的推理方法和模拟算法。此外, 我们不是通 过黑盒模型, 而是通过统一的动态微分方程 来解释这些复杂分布的生成动力学。至于实 验,我们通过各种合成数据集分析模型的属 性,并通过来自各个学科的 16 个经验数据 集进一步验证它。我们的模型准确地拟合了 所有这些复杂的经验数据(图 5)。我们的模 型可能提供一个框架,以适应在现实世界中 观察到的复杂分布, 更重要的是, 了解它们 的生成机制。我们总结了我们的归纳如下:

- 统一能力:我们提出了一个通用模型来拟合经验数据中的各种复杂分布,以及推理和模拟算法。
- 简约:我们的模型只有四个参数来 捕捉经验分布中的多尺度复杂性。
- 可解释性:我们的模型由统一的生成动力学方程解释。所有参数都有明确的物理意义。
- 实用性:我们的模型可以准确地拟合各种经验数据集,并且可以以原则的方式推广到更复杂的情况。

论文的大纲是:调查,模型,机制,实验,讨论和结论。复用性:软件和数据库是开放源码,www.calvinzang.com。

2 相关工作

我们主要回顾以下两个方面的相关工 作:

从经验数据中的简单分布到复杂分布。 窄尾分布,如指数分布和高斯分布,可以通 过它们的均值和方差很好地捕获,它们具有充分研究的基础结构和动力学。相比之下,重尾分布,如幂律分布,拉伸指数分布,对数正态分布等,表现出更大的均匀无穷大方差,这意味着复杂的基础结构和数据动态。在重尾分布中,幂律分布是最着名的分布,因为它具有缩放特性[22]和生成机制[2]。关于幂律分布的广泛证据和讨论可以在[13,16]中找到。最近,越来越多的文献发现经验数据的分布比纯粹的幂律更复杂,从人类行为数据[26,32],网络数据[3]到各种数据集,如图 5 所示。

拟合复杂的分布。可能使用先验或正则化因子的最大似然估计用于拟合窄尾分布[14]。另一方面,像 GAN 这样的深度生成网络通过拟合 1-D 参数分布得到验证,但表现出较大的偏差[24]。相比之下,对于复杂分布的拟合理论,比如偏斜或重尾分析[17],尚未确定。以最典型的壳体-幂律分布为例,视觉检测和最小二乘拟合首先用于拟合幂律分布。后来,well-celebrated 的工作[5]显示了最小二乘拟合方法的偏差,然后提出

了参数方法($f(x) = \frac{\alpha_{PL}-1}{x_{\min}} \left(\frac{x}{x_{\min}}\right)^{\alpha_{PL}}$)根据最大似然原则来拟合幂律分布。PL 方法已被广泛用于通过 大量科学论文拟合合理的幂律分布。然而,我们发现 PL 方法在检测现实世界数据中的幂律信号时表现出较大的偏差,如图 5 所示。失败的根源在于 PL 方法忽略了现实世界数据的复杂性[23,26,32]。如何通过统一模型拟合和解释经验数据集

中的各种复杂分布在很大程 度上是未知的。

3 提出的方法

3.1 直观模型

我们的直观模型如下:我们将具有复杂分布的经验数据视为从(非线性)动态系统生成,该系统将均匀随机性作为输入。我们试图捕捉它们统一的生成动力学,而不是对这个动态系统的复杂输出(即各种数据分布)进行建模,简而言之,我们试图模拟产生复杂现象的简单生成动力学。

我们的模型基于生存分析[32],点过程 [26] 和 动 态 系 统 [25,27,31]。数据 X =

 $(x_1,...,x_{n-1},x_n)$ 可以通过危险率函数 $\lambda(x) = \frac{f_X(x)}{S_Y(x)}$ 来建模,其描述了以 $X \ge x$ 为条 件的随机变量X = x的出现率,其中 $S_x(x) =$ $1 - \int_{-\infty}^{x} f_X(s) ds$. $\Lambda(x) = \int_{-\infty}^{x} \lambda(s) ds$ 表示累 积危险率。通过对危险率的建模, 我们可以 根据关系 $f_{\nu}(x) = \lambda(x)e^{-\int_{-\infty}^{x} \lambda(s)ds}$ 得到复杂 的概率密度函数。我们进一步建立危险函数 2(x)与其相应的动态系统之间的联系,以 解释下一节中数据分布的生成机制。

3.2 模型

XXXXXXXXXX

XXXXXXXX

图 1: 基本模型功能的图示。我们的模 型生成一系列分布,包括幂律(PL),具有 截止的 PL, 具有短尺度复杂度的 PL, 具有 多尺度复杂度的PL,指数,拉伸指数(SE), 具有短尺度复杂度的 SE, SE 具有多尺度复 杂性等。

在这里,我们提出简单但通用的基本模 型,导致各种分布,如表 1 和图 1 所示。 指定模型的危险率函数是:

$$\lambda(x) = \beta + \alpha(x + \Delta)^{-\theta} \tag{1}$$

3.2.1 关键案例:基于幂律的分布。当 $\theta = 1$ 时, $\lambda(x|\theta = 1)$ 基于幂律分布生成一系 列分布。

引理 3.1 $\lambda(x|\theta=1)$ 产生一系列分布, 从指数分布,幂律分布,指数截止的幂律分 布到复杂的多尺度分布。

证明: 随机变量x的概率密度函数为:

$$f(x|\theta = 1) = \lambda(x|\theta = 1)e^{-\int_0^x \lambda(s|\theta = 1)ds}$$
$$= \left(\beta + \frac{\alpha}{x+\Lambda}\right)e^{-\beta x - \alpha \ln\left(\frac{x}{\Delta} + 1\right)}$$
$$= \beta e^{-\beta x} \left(\frac{x}{\Delta} + 1\right)^{-\alpha}$$
$$+ \frac{\alpha}{\Lambda} \left(\frac{x}{\Delta} + 1\right)^{-(\alpha+1)} e^{-\beta x}$$

指数分布。当 $\alpha = 0$ 时,无论其他三个参 数如何, $\lambda(x|\alpha=0)$ 都会产生指数分布,概 率密度函数 $f(x|\alpha=0)=\beta e^{-\beta x}$,如图 1a 灰 度曲线所示。

幂律分布。 当 β = 0 且 Δ « x 时, $f(x|\theta = 1, \beta = 0) = \alpha \Delta^{\alpha} (x + \Delta)^{-(\alpha+1)} \propto$ $x^{-(\alpha+1)}$ 。 Δ 的另一个含义是最小值,称为 x_0 , x可以取: $f(x|\theta=1,\Delta=0) = \frac{\alpha}{r}e^{\int_{x_0}^x \frac{\alpha}{s}ds} =$ $\alpha x_0^{\alpha} x^{-(\alpha+1)}$.

具有截止的幂律分布。当 $\beta \gg 0$ 且 $\Delta \ll$ $x \ll \frac{\alpha}{\beta} - \Delta$, $f(x|\theta = 1) = \left(\beta + \frac{\alpha}{x + \Delta}\right)\left(\frac{x}{\Delta} + \frac{\alpha}{x + \Delta}\right)$ $1\Big)^{-\alpha}e^{-\beta x}\approx\alpha\Delta^{\alpha}x^{-(\alpha+1)}e^{-\beta x}.$

复杂的多尺度分布。当 $\beta \to 0$ 时,复数 多尺度分布具有常数短尺度,幂律中尺度和 指数长尺度。当 $x \to 0$ 时, $f(x|\theta = 1) \to \frac{\alpha}{\Lambda}$ 短尺度方程 $x \in (0,\Delta], f(x|\theta=1) \approx \frac{\alpha}{\Lambda} (\frac{x}{\Lambda} +$ 1) ((α+1) , 它慢慢衰减到幂律中等范围。当 $\beta e^{-\beta x} \left(\frac{x}{4}+1\right)^{-\alpha} \gg \frac{\alpha}{4} \left(\frac{x}{4}+1\right)^{-(\alpha+1)} e^{-\beta x}$,即 $x \gg \frac{\alpha}{\beta} - \Delta, f(x|\theta = 1) = \beta e^{-\beta x} \left(\frac{x}{\Delta} + \frac{\alpha}{\beta}\right)$ $1\Big)^{-\alpha} + \frac{\alpha}{4} \left(\frac{x}{4} + 1\right)^{-(\alpha+1)} e^{-\beta x} \approx \beta e^{-\beta x} \left(\frac{x}{4} + 1\right)^{-(\alpha+1)}$ 1)^{- α},这是指数长尺度方程。当 $\Delta \ll x \ll \frac{\alpha}{\beta}$ - Δ , $f(x|\theta=1) \approx \alpha \Delta^{\alpha} (x+\Delta)^{-(\alpha+1)} \propto$ $x^{-(\alpha+1)}$, 这是幂律中等尺度方程。

3.2.2 一般情况:基于拉伸指数的分布。 成一族分布时。

引理 3.2。 $\lambda(x|\theta \neq 1)$ 生成家族分布,从指数分布,拉伸指数(Weibull)分布,拉伸指数分布,指数切割到复杂的多尺度分布。

证明:与上述理由类似,随机变量 x 的概率密度函数为:

$$f(x|\theta \neq 1) = \lambda(x|\theta \neq 1)e^{-\int_0^x \lambda(s|\theta \neq 1)ds}$$

$$= \left[\beta + \alpha(x+\Delta)^{-\theta}\right]e^{-\beta x - \frac{\alpha}{1-\theta}[(x+\Delta)^{1-\theta} - \Delta^{1-\theta}]}$$

$$= \beta e^{-\beta x}e^{-\frac{\alpha}{1-\theta}[(x+\Delta)^{1-\theta} - \Delta^{1-\theta}]}$$

$$+\alpha(x+\Delta)^{-\theta}e^{-\frac{\alpha}{1-\theta}[(x+\Delta)^{1-\theta}-\Delta^{1-\theta}]}e^{-\beta x}$$

指数分布。当 $\beta = \theta = 0$, $f(x|\beta = 0, \theta = 0) = \alpha e^{-\alpha x}$ 。

拉伸指数 (Weibull) 分布。当 $\beta = 0$ 且 $\Delta = 0$, $\lambda(x|\theta \neq 1)$ 会有

$$f(x|\theta \neq 1) = \alpha x^{-\theta} e^{-\frac{\alpha}{1-\theta}x^{1-\theta}}$$

累 积 密 度 函 数 是 $F(x|\theta \neq 1) = 1 - e^{-\frac{\alpha}{1-\theta}x^{1-\theta}}$ 。这是拉伸的指数分布。一些特殊情况: 当 $\theta = 0$ 时为指数分布 $\alpha e^{-\alpha x}$,当 $\theta = -1$ 近似正态分布 $\frac{\alpha}{x^2}e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$ 。

具有指数切割的拉伸指数分布。当 $\beta \gg$ 0且 $\Delta \ll x \ll \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^{\frac{1}{\theta}} - \Delta$, $f(x|\theta \neq 1) = [\beta + \alpha(x+\Delta)^{-\theta}]e^{-\frac{\alpha}{1-\theta}[(x+\Delta)^{1-\theta}-\Delta^{1-\theta}]}e^{-\beta x} \approx$ $\alpha x^{-\theta}e^{-\frac{\alpha}{1-\theta}x^{1-\theta}}e^{-\beta x}$ 。

复杂的多尺度分布。当 $\theta \neq 1$ 时,复数多尺度分布基于拉伸指数分布。当 $\beta \to 0$ 时,复数多尺度分布具有常数短尺度,拉伸指数具有中尺度和指数具有长尺度,当x = 0时, $f(x|\theta \neq 1) \approx \frac{\alpha}{\Delta^{\theta}}$ 。 在短尺度方案中 $x \in (0,\Delta], f(x|\theta \neq 1) \approx \alpha(x+\Delta)^{-\theta}e^{-\frac{\alpha}{1-\theta}}[(x+\Delta)^{1-\theta}-\Delta^{1-\theta}]$,它缓慢地衰减到拉伸的指数中尺度范围。当 $\beta \gg \alpha(x+\Delta)^{-\theta}$,即 $x \gg$

我们在图 1 中说明了上述理由。我们发现基于幂律分布的复杂分布(图 1a)和拉伸指数分布(图 1b)是由我们的简单危险函数生成的,可能在多尺度机制中具有复杂性。

3.3 参数推理

我们的模型参数可以通过最大似然估计(MLE)框架来学习。观察一组数据 $\{x_1,...,x_{n-1},x_n\}$ 的对数似然函数由下式给出:

$$\ln L(x_1, ..., x_n) = \ln \prod_{i=1}^n \lambda(x_i) e^{-\Lambda(x_i)}$$
$$= \sum_{i=1}^n \ln \lambda(x_i) - \sum_{i=1}^n \Lambda(x_i)$$

根据 θ 的值, $\Lambda(x)$ 采用不同的形式。当 $\theta \neq 1$ 时,对数似然函数是

$$\ln L(x_1, ..., x_n | \theta \neq 1)$$

$$= \sum_{i=1}^n \ln[\beta + \alpha(x_i + \Delta)^{-\theta}]$$

$$-\beta \sum_{i=1}^n x_i$$

$$-\frac{\alpha}{1-\theta} \sum_{i=1}^n [(x_i + \Delta)^{1-\theta}]$$

$$-\Delta^{1-\theta}]$$

然而当 θ = 1时,对数似然函数是:

$$\begin{split} \ln L\left(x_{1},\ldots,x_{n}|\theta=1\right) \\ &=\sum_{i=1}^{n}\ln[\beta+\alpha(x_{i}+\Delta)^{-1}] \\ &-\beta\sum_{i=1}^{n}x_{i} \\ &-\alpha\sum_{i=1}^{n}\ln\left(\frac{x_{i}}{\Delta}+1\right) \end{split}$$

关于 $\{\beta,\alpha,\Delta,\theta\}$ 的最大化等式 5 或 6, 受 $\{\beta,\alpha,\theta\geq 0; \Delta>0\}$ 的约束导致估计的建模参数。但是,由于参数的物理意义明确,可以将先验知识应用于初始化。我们稍后会说明这一点。

该模型的另一个优点是所有参数都具有闭合形式的梯度。 $\theta \neq 1$ 情况的梯度,即基于拉伸指数的模型,是:

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{A(i)} - \sum_{i=1}^{n} x_i$$

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \alpha} = \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i + \Delta)^{-\theta}}{A(i)}$$

$$-\frac{1}{1 - \theta} \sum_{i=1}^{n} [(x_i + \Delta)^{1 - \theta} - \Delta^{1 - \theta}]$$

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \Delta} = -\alpha \theta \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i + \Delta)^{-\theta - 1}}{A(i)}$$

$$-\alpha \sum_{i=1}^{n} [(x_i + \Delta)^{-\theta} - \Delta^{-\theta}]$$

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \theta} = -\alpha \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i + \Delta)^{-\theta} \ln(x_i + \Delta)}{A(i)}$$

1111111111111111111111

约束条件: $A(i) = \beta + \alpha(x_i + \Delta)^{-\theta}$ 当 $\theta = 1$ 时,基于幂律的模型的梯度是:

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{B(i)} - \sum_{i=1}^{n} x_i$$

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \alpha} = \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i + \Delta)^{-1}}{B(i)} - \sum_{i=1}^{n} \ln \left(\frac{x_i}{\Delta} + 1 \right)$$

$$\frac{\partial \ln L}{\partial \Delta} = -\alpha \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_i + \Delta)^{-2}}{B(i)} + \alpha \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{x_i \Delta + \Delta^2}$$
约束条件: $B(i) = \beta + \frac{\alpha}{x_i + \Delta}$

我们可以通过许多基于梯度的优化算法来解决优化问题。例如,我们采用内点算法[4],为了重现性,我们打开代码,参见第7节。

3.4 生成器

从累积分布函数F(x)生成随机数x的最简单和最优雅的方法是逆变换方法[7]。首先我们从标准均匀分布U(0,1]生成一个随机数 u。通过求解方程F(x)=u表示x,x是跟随分布F(x)

的数。我们将这个逆变换方法扩展到由 $F(x) = 1 - e^{-\Lambda(x)}$ 的事实导致的危险率函数,

其中
$$\Lambda(x) = \int_{x_0}^x \lambda(s) ds$$
。因此, $F(x) = u = 1 - e^{-\Lambda(x)}$,我们可以通过求解 $\Lambda(x) = -\ln(1-u)$

得到所需的随机数,其中u和从U(0,1]采样时1-u没有区别。由于 $\Lambda(x)$ 是单调递增函数,因此具有反函数 Λ^{-1} ,我们可以得到

$$x = \Lambda^{-1}(-\ln u)$$

即使没有闭合形式的反函数 Λ^{-1} ,我们也可以通过求解方程 $\ln u + \Lambda(x) = 0$ 来得到数值,其中u是从均匀分布U(0,1)生成的。

伪代码

4 物理机制

在本节中,我们给出了模型的基本生成动力学,即 Equ.1 和各种分布,如表 1 所示。 我们将复杂数据分布视为由(非线性)动态系统生成,采用均匀随机性作为输入:

4.1 统一输入和增长

为了给出数据生成过程的动态视图,我

们的第一步是通过连接点过程和生存分析来计算动态系统的输入。我们从标准均匀分布U(0,1]中采样n个数的过程可以看作是一个随机点过程。给定泊松过程N(t) = $\{t_i|i=1,...,N(t)=n;t_i\leq t_2\leq ...\leq t_n\}$,然后 t_i 是均匀分布在区间(0,t]上。如果我们将 t_i 标准化为t,则 $u=\frac{t_i}{t}$ 遵循标准均匀分布U(0,1]。

我们将 Equ.15 中的u替换为 $\frac{t_i}{t}$,导致代理i的增长动态,其中(0,t]的均匀到达时间 t_i :

$$x_i(t) = \Lambda^{-1}(-\ln u) = \Lambda^{-1}\left(-\ln\left(\frac{t_i}{t}\right)\right)$$
$$= \Lambda^{-1}\left(\ln\left(\frac{t}{t_i}\right)\right)$$

例如,让 $\lambda(x) = \alpha x^{-\theta}$,当 $\theta = 1$ 时它产生幂律分布 $f(x) = \alpha \Delta^{\alpha} x^{-(\alpha+1)}$ 。并且当 $\theta \neq 1$ 时,拉伸指数分布为 $f(x) = \alpha x^{-\theta} e^{-\frac{\alpha}{1-\theta} x^{1-\theta}}$ (详见第 3 节)。因此, $\Lambda(x|\theta=1) = \alpha \int_{\Delta}^{x} \frac{1}{s} ds = \alpha \ln\left(\frac{x}{\Delta}\right), \quad \text{并且}$ $\Lambda(x|\theta\neq 1) = \alpha \int_{\Delta}^{x} \frac{1}{s^{\theta}} ds = \frac{\alpha(x^{1-\theta} - \Delta^{1-\theta})}{1-\theta} \text{。我}$ 们可以得到它们的反函数 $\Lambda^{-1}(y|\theta=1) = \Delta e^{\frac{y}{\alpha}}$,和 $\Lambda^{-1}(y|\theta\neq 1) = \left(\frac{1-\theta}{\alpha}y + \Delta^{1-\theta}\right)^{\frac{1}{1-\theta}}$ 。通过在 Equ.16 中使用 $\Lambda^{-1}(y|\theta=1) = \Delta e^{\frac{y}{\alpha}}$,我们获得了超过时间的增长曲线t:

$$x_i(t) = \Lambda^{-1} \left(\ln \left(\frac{t}{t_i} \right) \middle| \theta = 1 \right) = \Delta e^{\frac{\ln \left(\frac{t}{t_i} \right)}{\alpha}}$$
$$= \Delta \left(\frac{t}{t_i} \right)^{\frac{1}{\alpha}}$$

类似地,当 $\theta < 1$ 时,通过将 $\Lambda^{-1}(y|\theta \neq 1) = \left(\frac{1-\theta}{\alpha}y + \Delta^{1-\theta}\right)^{\frac{1}{1-\theta}}$ 应用于等式 16,我们得到增长曲线:

$$\begin{split} x_i(t) &= \Lambda^{-1} \left(\ln \left(\frac{t}{t_i} \right) \middle| \theta \neq 1 \right) \\ &= \left(\frac{1 - \theta}{\alpha} \ln \left(\frac{t}{t_i} \right) \right. \\ &+ \Delta^{1 - \theta} \left. \right) \frac{1}{1 - \theta} \end{split}$$

4.2 生成动力学:基础模型

我们的第二步是通过连接生存分析和 动态系统来逆向工程生成动力学。我们将 Equ.17 和 Eq.18 的导数推导到时间t,我们 得到幂律分布数据和拉伸指数分布数据的 生成动力学如下:

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \frac{d\Delta \left(\frac{t}{t_i}\right)^{\frac{1}{\alpha}}}{dt} \frac{\Delta}{t_i^{\frac{1}{\alpha}}} \frac{1}{\alpha} t^{\frac{1}{\alpha}-1} = \frac{x_i(t)}{\alpha t}$$

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \frac{d\left(\frac{1-\theta}{\alpha}\ln\left(\frac{t}{t_i}\right) + \Delta^{1-\theta}\right)^{\frac{1}{1-\theta}}}{dt}$$

$$= \frac{\left(\frac{1-\theta}{\alpha}\ln\left(\frac{t}{t_i}\right) + \Delta^{1-\theta}\right)^{\frac{\theta}{1-\theta}}}{\alpha t}$$

$$= \frac{x_i(t)^{\theta}}{\alpha t}$$

我们发现方程 19 的线性优先附着产生 幂律分布,而等于 20 的非线性优先附着产 生拉伸指数分布,与随机网络中无标度观测 的文献一致【2】。

4.3 生成动力学: 一般模型

在这里,我们给出了模型的生成动力学。 当 $\lambda(x) = \beta + \alpha(x + \Delta)^{-\theta}$ 时 , $\Lambda(x) = \int_0^x \lambda(s) ds = \beta x + \frac{\alpha}{1-\theta} [(x + \Delta)^{1-\theta} - \Delta^{1-\theta}].$

通过我们的建设,我们得到:

$$\begin{split} \Lambda \big(x_i(t) \big) &= \beta x_i(t) \\ &+ \frac{\alpha}{1-\theta} \big[(x_i(t) + \Delta)^{1-\theta} \\ &- \Delta^{1-\theta} \big] &= \ln \frac{t}{t_i} \end{split}$$

通过将上述方程的导数推导到时间t,

我们得到:

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \frac{(x_i(t) + \Delta)^{\theta}}{\beta(x_i(t) + \Delta)^{\theta}t + \alpha t}$$

因此,从动态的角度来看,表现出复杂多尺度分布的复杂数据(由我们的模型 Equ.1 捕获)是从具有微分方程 22 的动态系统生成的,包括物理机制: 非线性优先附着 $(x_i(t) + \Delta)^{\theta}$,增长系统,以及短期复杂度 Δ 和长期复杂度 $\beta(x_i(t) + \Delta)^{\theta}t$ 。我们的动态包括 Equ.19 和 20 作为特殊情况。

因此,我们在随机网络场景中描述数据 生成过程如下:

- 新节点i在0 < t_i < t的泊松过程后 进入网络,其中t是最大观测时间,
- 并且,节点*i*的程度,表示为x_i(t),根据微分方程 22 随时间增长。

然后,该网络在时间t的横截面度分布

为 $f_X(x) = \lambda(x)e^{-\int_{-\infty}^x \lambda(s)ds}$,其中 $\lambda(x) = \beta + \alpha(x+\Delta)^{-\theta}$ 如 Equ.1 所示。

5.1 综合数据分析

5.1.1 忽略完整性会导致系统偏差。实际上,衡量现实世界数据量的分布要比纯幂律分布复杂得多。我们将在下一节中展示来自真实世界数据集的证据。在这里,我们研究了通过将着名的幂律拟合方法(表示为 PL方法)[5]应用于复杂分布而引入的可能偏差。

长期复杂性。我们首先研究长期复杂性。 参数 β 作为建模长尺度复杂性的最简单形式。 通过改变 $\lambda(x|\beta,\alpha=0.5,\Delta=50,\theta=1)$ 中的 β ,我们得到了图 3a 中所示的一系列分布。 当 $\beta=0$ 时的情况,如图 3a 中蓝色曲线的直线部分(幂律指数 $1+\alpha=1.5$)所示,表明缺少长尺度复杂性。随着 β 的增加,长尺度的复杂性将向短距离移动,直到两个部分重

叠。实际上,长期制度的特征尺度是 $\frac{\alpha}{\beta}$,短期制度的特征尺度是 Δ (参见第 3 节)。我们通过限制 β < 10^{-2} 来避免这种重叠。我们生成104(一个相对较大的数据集,以获得合理的拟合结果,同时在基线方法的可扩展性限制内。我们将在稍后显示模型和基线的可扩展性。) 采 用 每 个 特 定 β 的

 $\lambda(\mathbf{x}|\boldsymbol{\beta},\alpha=0.5,\Delta=50,\theta=1)$ 样本,并通过 PL 方法和我们的方法拟合 α 和 Δ 。图 3e 和i 绘制了 α (缩放指数)和 Δ 作为 β 的函数的平均估计值。我们发现 PL 方法估计的幂律缩放参数 α 与虚线标记的真值之间的差异越来越大, β 增加,如图 3e 所示。相比之下,我们的模型很好地获得了真正的缩放值。对于图 3i 所示的短尺度 Δ 的估计,PL 方法严重高估了真实值,当 $\beta\approx3*10^{-5}$ 时,真实值高达 450 倍。随着 β 的增长,长期制度挤入短期制度,因此通过 PL 方法估计的 Δ 降低到真实值。

短期复杂性。然后我们考虑短期复杂性 的影响。参数△是捕获短尺度方案特征尺度 的最简单形式。图 3b 绘制了 $\lambda(x|\beta=0,\alpha=0.5,\Delta,\theta=1)$ 随着 Δ 变化,其 由短尺度方案和随后具有相同斜率的幂律 方案组成。Δ越大,短期规模越大,因此范围 越广。类似地, 我们通过 $\lambda(x|\beta = 0, \alpha = 0.5, \Delta, \theta = 1)$ 生成 104 个样 本,每个特定的 Δ ,并通过 PL 方法和我们的 方法拟合 α 和 Δ 。我们的模型很好地拟合了两 个参数的实际数据,如图 3f 和图 3i 所示。 对于这个特殊的实验设置, PL 方法在拟合 比例指数 α 方面做得很好,但是 α 的良好结果 是以严重高估 Δ 为代价,表明 PL 方法丢弃了 短程方案中的数据样本,占整个数据集的 280%。

中等规模的复杂性。最后但同样重要的是,我们研究了中等规模的复杂性。当 θ = 1时,中等规模的制度遵循幂律,其中缩放指数为1+ α 。通过在控制其他参数时改变 $\lambda(x|\beta=0,\alpha,\Delta,\theta=1)$ 中的 α ,我们得到中等和规模体系下幂律分布的不同比例指数。图3c 绘制了 $\lambda(x|\beta=0,\alpha,\Delta=50,\theta=1)$ 作为变化, α 越大,曲线越陡峭。然而,我们发现,随着生长,PL 方法低估了缩放参数 α ,并且差异变得越来越大,如图 3g 所示。此外,PL 方法同时严重高估了短程参数 δ ,最高达 3 个数量级,如图 3k 所示。相比之下,我们的模型始终如一地达到了真正的价值。

当 $\theta \neq 1$ 时,中等规模的<mark>政权</mark>遵循拉伸指数定律。图3d 绘制 $\lambda(x|\beta=0,\alpha=1,\Delta=50,\theta)$,随着 θ 的变化

图像。 $\theta = 1$ 的红色曲线是幂律分布(在中等和长期状态下),pdf 曲线的斜率 $\alpha + 1 = 2$,而其他曲线是拉伸的指数分布。我们无法通过视觉检查来区分这些幂律或拉伸指数曲线之间的差异。幂律工具和泰勒展开可以用于在稍后的渐近分析部分中分析该方案中的复杂性。在 $(-\infty,1+\epsilon]$ 且 $\epsilon \to 0$ (参考渐近分析部分)的范围内, θ 越大,曲线的尾部越粗,如图 3d 所示。我们发现 PL 方法在 $\theta < 1$ 时过高估计了缩放参数 α ,并且当图 3h 中所示的 $\theta > 1$ 时低估了 α 。同时,PL 方法一直高估 Δ ,如图 31 所示。相反,我们的模型再次给出了更好的估计。

5.1.2 渐近行为。我们分析了模型的渐近 行为。以拉伸指数为例,其渐近行为导致与 幂律分布的混淆和分布的复杂尺度定律。 pdf 图片中,拉伸指数分布的函数是对于x >

 $0, f(x|\theta \neq 1) = \alpha x^{-\theta} e^{-\frac{\alpha}{1-\theta} x^{1-\theta}}$ 。通过在 $x \to 0$ 和 $\theta < 1$ 时应用泰勒展开式,我们得到:

$$f(x \to 0 | \theta < 1) = \frac{\alpha}{x^{\theta}} \left[1 - \frac{\alpha}{1 - \theta} x^{1 - \theta} + O\left(x^{2 - 2\theta}\right) \right]$$

但比指数衰减 $e^{-\frac{\alpha}{1-\theta}x^1}$ 慢。

当 $\theta > 1$ 且 $x \to \infty$ 时,我们得到泰勒展开: $f(x \to \infty | \theta > 1)$

$$= \frac{\alpha}{x^{\theta}} \left[1 + \frac{\alpha}{(\theta - 1)x^{\theta - 1}} + O\left(\frac{1}{x^{2\theta - 2}}\right) \right]$$

$$\approx \alpha \frac{1}{x^{\theta}} + \frac{\alpha^2}{\theta - 1} \frac{1}{x^{2\theta - 1}}$$

近似于幂律分布,其中缩放指数由缩放 参数 θ 和 $2\theta-1$ 交替 控制。 当 $\theta=1+$

 ϵ 其中 $\epsilon \to 0^+$ 时,看系数 $\frac{\alpha^2}{\theta - 1} \gg \alpha$,因此 $f(x \to \infty | \theta = 1 + \epsilon, \epsilon \to 0^+) \approx \frac{\alpha^2}{\theta - 1} \frac{1}{x^{2\theta - 1}} =$ $\frac{\alpha^2}{\theta - 1} \frac{1}{x^{1+2\epsilon}}, \ \, 表示缩放指数1 + 2\epsilon, 其中\epsilon \to 0^+.$ 相反,当 0> 1 时,f(x-→0o10> 1) ~号,

表示缩放指数 θ ,其中 $\theta \gg 1$ 。因此,在数学上,我们得出结论经验幂律观察可以来自拉伸指数分布的渐近行为。此外,一个有趣的现象是,当 θ 从 1 增加时,分布曲线首先变得更胖然后回到先前的状态并且更陡峭和更陡峭。上述渐近分析可以通过具有不同 θ 值的分布的崩溃来验证,如图 4a 所示。

5.1.3 可扩展性。我们在数值上比较了模型的可扩展性和幂律(PL)方法。我们从幂律分布配置 1 生成 N 个样本 $\lambda(x|\beta=0,\alpha=1,\Delta=50,\theta=1)$,并且通过改变N,我们绘制了图 4b 中两种方法消耗的平均时间。幂律方法与复杂度 $\approx O\left(N^2\right)$ 成比例。幂律方法的样本大小的经验法则上限是 10^5 。PL 方法的可扩展性更差是由于 Δ 的网格搜索[5]。但是,我们的方法可以以更快的速度应用于更大的数据集。例如,当 $N=10^5$ 时,我们得到快约 $2*10^3$ 倍。

5.2 现实世界的数据分析

- 5.2.1 数据集。我们通过来自各种不同人类努力的 16 个真实世界数据集来验证我们的方法。根据数据集的时间性质,我们将它们分类为横截面数据和动态数据。前八个数据集来自横截面上的变化:
- (a) 赫尔曼梅尔维尔在小说"白鲸记" 中出现的词数[16]。
- (b) 1968 年 2 月至 2006 年 6 月全球 恐怖主义袭击事件造成的死亡人数[6]。
- (c)每个分类群体在地球上的哺乳动物数量[20]。
- (d)1984 年至 2002 年期间受美国停电 影响的客户数量[16]。
- (e) 2000 年美国人口普查中的美国城市人口[5]。

- (f) 1986 年至 1996 年期间在美国发生的野火的大小[16]。
- (g)1910 年至 1992 年期间在加利福尼亚发生的地震强度[16]。
- (h) 电影演员双方网络中的演员程度 最后八个来自人类或社会动态的动态 记录:
- (i)活跃用户在微信中添加连续朋友的事件间事件[25,26]。
- ()来自移动电话用户的短消息的 **IET** [23]。
- (k),(1)爱因斯坦和弗洛伊德一生中信件通信的响应时间[18]。
- (m)在大学3个月期间发送两封连续电子邮件的个人之间的时间间隔[1,21]。
- (n) 腾讯微博信息级联中两次转发的时间间隔[28,29]。
- (o) 腾讯 QQ 在线群聊聊行为的时间间隔[32]。
- (p)连续修订一个维基百科项目的时间间隔[30]。

我们编译并公开所有数据集(参见第7节)的可重复性,其中最后八个数据集作为 人类和社会动态的第一个数据集。

5.2.2 结果。我们通过回答我们的模型是否可以捕获所有经验数据集来验证我们的方法。我们将我们的方法与[5]中开发的最先进方法进行了比较,表示为 PL 模型,广泛用于拟合可能遵循幂律的胖尾分布。

图 5 绘制了真实数据集,通过 PL 模型和我们的模型拟合结果。我们发现现实世界数据集的分布比纯幂律分布复杂得多。对于不同的数据,其分布表现出不同的多尺度复杂性。然而,我们的模型(绿色圆圈)和所有图中的真实数据(紫色方块)的重叠表明模型的良好性能,即使通过视觉检查。根据合成数据分析,分布中的多尺度复杂性导致严重高估 PL 模型的 xmin,并且我们还在真实数据集中观察到这些偏差,如图 5 所示。因此, f(x)由 PL 模型学习的系统偏差,如思示,PL 结果的灰色三角形和表示实际数据的紫色方块的差异所示。

然后我们进行定量分析。给定实数 $X = \{x_1, ..., x_n\}$,我们学习了由 PL 方法和我们的

方法建模的 $f(x|\Theta)$ 的参数 Θ 。然后,我们从我们的方法生成模拟数据样本。从 PL 方法表示为 $X_{\mathrm{our}} = \left\{x_1, ..., x_{n'}\right\}$ 和 $X_{PL} = \left\{x_1, ..., x_{n'}\right\}$ 。我们通过双样本 Kolmogorov-Smirnov 距离(KS-Dist)评估拟合精度,即 KS - Dist = $\max_{x} |\widehat{F}_{t}(x) - F(x)|$,越低越好。F(x)是从实际数据学习的非参数累积分布,

F(x)是从实际数据学习的非参数累积分布,而 $\hat{F}(x)$ 是通过方法i从模拟数据集学习的非参数累积分布。双样本 Kolmogorov-Smirnov 距离广泛用于此标准统计测试任务。为了消除由于生成的样本数量较少而导致的错误,我们设置n'=10*n。我们总结了表 2 中的数据和结果。我们发现对于所有 16 个数据集,我们的方法比 PI 方法得到更低的误差,即 KS-Dist,表明我们的方法的优越性。

6 讨论

我们的展示模型的设计原则是:保持简单,捕捉复杂。只有一个参数Δ用于捕捉短尺度方案的复杂性,一个参数β用于捕捉长尺度方案的复杂性,一个参数β用于包含中等尺度的幂律分布和拉伸指数分布政权。但是,可以通过我们的框架做出更多努力。例如,可以进一步利用混合物重尾模型,对数正态分布。我们可以预期经验数据和拟合结果之间的误差要小得多。但是,无论模型有多复杂,建模参数都应该是可解释的。此外,可以通过贝叶斯框架捕获关于参数的先验知识。应该检查更多真实世界的数据集。应重新检查以前基于在复杂分布上应用 PL 方法的结论。

7 结论

在本文中,我们发现各种经验数据的分布,从艺术,生物学,物理学,地质学,社会科学到计算机科学,从横断面观察到动态记录,具有多尺度的复杂性。我们开发了一个动态框架,以适应现实世界中复杂的分布。通过对数据的生成动力学建模,我们极大地简化了模型的数学形式,但同时生成了大量复杂的分布。提供了有效的推理方法和数据

生成算法。我们用一个统一的微分方程来解释这些复杂分布的生成机制,而不是黑盒模型。我们通过各种合成数据集分析模型的属性,并通过各种实际数据集验证我们的模型。我们的模型很好地捕捉了所有这些数据的复杂性。我们的模型可能提供一个框架,以便在经验数据中拟合复杂的分布,并了解它们的生成机制。简而言之,我们总结了我们的贡献如下:

- 统一能力:我们提出了一个通用模型,以适应经验数据中的各种复杂分布,以及推理和模拟算法。
- 简约:有了四个参数,我们的模型 有一个简单的形式来捕捉经验分 布中的多尺度复杂性。
- 可解释性:我们的模型由统一的生成动力学方程解释。所有参数在随机网络场景中都具有明确的物理意义。
- 实用性:我们的模型准确地拟合了各种学科中复杂的经验数据集分布,并且可以以原则的方式推广到更复杂的案例。

我们在 www.calvinzang.com 开源代码和数据集。

致谢

作者感谢匿名审稿人提供了许多有用的讨论和富有洞察力的建议。这项工作部分得到国家重点基础研究项目No.2015CB352300,国家自然科学基金重大项目No.U1611461的支持;国家自然科学基No.61772304,61521002,61531006,61702296。感谢清华-腾讯互联网创新技术联合实验室的研究基金,以及CAST的青年精英科学家赞助项目。

参考文献

- [1] Albert-Laszlo Barabasi.2005. The origin of bursts and heavy tails in human dynamics. Nature 435,7039(2005),207-211.
- [2] Albert-Laszló Barabasi and Reka Albert.1999. Emergence of scaling in

- random networks. science 286,5439(1999),509-512.
- [3] Anna D Broido and Aaron Clauset.2018. Scale-free networks are rare. arXiv preprint arXiv:1801.03400(2018).
- [4] Richard H Byrd, Jean Charles Gilbert, and Jorge Nocedal.2000.A trust region method based on interior point techniques for nonlinear programming. Mathematical Programming 89,1(2000),149-185.
- [5] Aaron Clauset, Cosma Rohilla Shalizi, and Mark EJ Newman.2009. Power-law distributions in empirical data. SIAM review 51,4(2009),661-703.
- [6] Aaron Clauset, Maxwell Young, and Kristian Skrede Gleditsch.2007. On the frequency of severe terrorist events. Journal of Conflict Resolution 51,1(2007), 58-87.
- [7] Luc Devroye.1986. Sample-based non-uniform random variate generation. In Proceedings of the 18th conference on Winter simulation. ACM,260-265.
- [8] Michalis Faloutsos, Petros Faloutsos, and Christos Faloutsos.1999. On power-law relationships of the internet topology. In ACM SIGCOMM computer communication review, Vol.29. ACM,251-262.
- [9] Benjamin H Good, MichaelJ McDonald, Jeffrey E Barrick, Richard E Lenski, and Michael M Desai.2017. The dynamics of molecular evolution over 60,000 generations. Nature 551,7678(2017),45.
- [10] Ian Goodfellow, Jean Pouget-Abadie, Mehdi Mirza, Bing Xu, David Warde-Farley, Sherjil Ozair, Aaron

- Courville, and Yoshua Bengio.2014. Generative adversarial nets. In Advances in neural information processing systems.2672-2680.
- [11] Lei Guo, Enhua Tan, Songqing Chen, Zhen Xiao, and Xiaodong Zhang.2008. The stretched exponential distribution of internet media access patterns. Proceedings of the twenty-seventh ACM symposium on Principles of distributed computing. ACM,283-294.
- [12] R Dean Malmgren, Daniel B Stouffer, Adilson E Motter, and Luis AN Amaral.2008. A Poissonian explanation for heavy tails in e-mail communication. Proceedings of the National Academy of Sciences 105,47(2008),18153-18158.
- [13] Michael Mitzenmacher.2004.A brief history of generative models for power law and lognormal distributions. Internet mathematics 1,2(2004),226-251.
- [14] Kevin P. Murphy.2014. Machine learning,a probabilistic perspective.(2014).
- [15] Mitchell G Newberry, Christopher A Ahern, Robin Clark, and Joshua B Plotkin. 2017. Detecting evolutionary forces in language change. Nature 551,7679(2017), 223.
- [16] Mark EJ Newman.2005. Power laws, Pareto distributions and Zipf's law. Contemporary physics 46,5(2005),323-351.
- [17] John Nolan.2003. Stable distributions: models for heavy-tailed data. Birkhauser New York.
- [18] Joao Gama Oliveira and Albert-Laszlo Barabasi.2005. Human dynamics: Darwin and Einstein correspondence patterns. Nature

- 437,7063(2005),1251-1251.
- [19] Douglas Reynolds.2015. Gaussian mixture models. Encyclopedia of biometrics (2015),827-832.
- [20] Felisa A Smith,S Kathleen Lyons, SK Ernest, Kate E Jones, Dawn M Kaufman, Tamar Dayan, Pablo A Marquet, James H Brown, and John P Haskell.2003. Body mass of late Quaternary mammals. Ecology 84,12(2003),3403-3403.
- [21] Alexei Vazquez, Joao Gama Oliveira, Zoltan Dezso, Kwang-III Goh, Imre Kondor, and Albert-Laszlo Barabasi.2006. Modeling bursts and heavy tails in human dynamics. Physical Review E 73,3(2006),036127.
- [22] GWest.2017. Scale: The universal laws of growth, innovation, sustainability and the pace of life in organisms and companies.(2017).
- [23] Ye Wu, Changsong Zhou, Jinghua Xiao, Jirgen Kurths, and Hans Joachim Schellnhuber.2010. Evidence for a bimodal distribution in human communication. PNAS 107,44(2010),18803-18808.
- [24] Manzil Zaheer, Chun-Liang Li,
 Barnabas Poczos, and Ruslan
 Salakhutdinov.2017. GAN
 Connoisseur: Can GANs Learn
 Simple 1D Parametric
 Distributions?(2017).
- [25] Chengxi Zang, Peng Cui, and Christos Faloutsos.2016. Beyond Sigmoids: The NetTide Model for Social Network Growth, and Its Applications. In Proceedings of the 22Nd ACM SIGKDD(KDD '16). ACM,2015-2024.
- [26] Chengxi Zang, Peng Cui, ChristosFaloutsos, and Wenwu Zhu.2017.Long Short Memory Process:

- Modeling Growth Dynamics of Microscopic Social Connectivity. In Proceedings of the 23rd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. ACM,565-574.
- [27] Chengxi Zang, Peng Cui, Christos Faloutsos, and Wenwu Zhu.2018. On Power Law Growth of Social Networks. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering(2018).
- [28] Chengxi Zang, Peng Cui, Chaoming Song, Christos Faloutsos, and Wenwu Zhu.2017. Quantifying Structural Patterns of Information Cascades. In Proceedings of the 26th International Conference on WWW Companion.867-868.
- [29] Chengxi Zang, Peng Cui, Chaoming Song, Christos Faloutsos, and Wenwu Zhu.2017. Structural patterns of information cascades and their implications for dynamics and semantics. arXiv preprint arXiv:1708.02377(2017).
- [30] Yilong Zha, Tao Zhou, and Changsong Zhou.2016. Unfolding large-scale onlinecollaborative human dynamics. Proceedings of the National Academy of Sciences 113,51(2016),14627-14632.
- [31] Tianyang Zhang, Peng Cui, Christos Faloutsos, Yunfei Lu, Hao Ye, Wenwu Zhu, and Shiqiang Yang.2016. Come-and-go patterns of group evolution: A dynamic model. In Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. ACM,1355-1364.
- [32] Tianyang Zhang, Peng Cui, Chaoming Song, Wenwu Zhu, and Shiqiang Yang.2016.A multiscale

survival process for modeling human activity patterns. PloS one 11,3(2016),e0151473.