Анализ выбора априорного распределения для смеси экспертов *

А. В. Грабовой 1 , В. В. Стрижов 2

Аннотация: Данная работа посвящен анализу свойств смеси экспертов в зависимости от выбора априорного распределения. Анализируется случай, когда выбрано информативное и неинформативное априорное распределения весов параметров каждого эксперта. В качестве экспертов рассматриваются линейные модели, а в качестве гипермодели рассматриваются нейросеть с функцией softmax на последнем слое. В качестве базовой задачи рассматриваются задача поиска окружностей на изображении. Предполагаются, что каждой окружности на изображении соответсвуют свой эксперт. В данной работе рассматриваются случай, когда априорные распределения разных моделей являются независимы, а также случай, когда эти распределения являются зависимыми. В качестве данных рассматриваются синтетически сгенерированные окружности с разным уровнем шума. Сравниваются устойчивость к шуму мультимомделей с задаными априорными распределениями на вектора параметров локальных моделей и без задания априорного распределения.

Ключевые слова: смесь экспертов; байесовский выбор модели; априорное распределение.

1 Введение

В данной работе рассматривается задача смеси экспертов. Смесь экспертов — это мультимодель, которая линейно взвешивает локальных моделей аппроксимирующих выборку. Значение весовых коэффициенты зависят от того объекта для которого производится предсказание.

^{*}Работа выполнена при поддержке РФФИ и правительства РФ.

¹Московский физико-технический институт, grabovoy.av@phystech.edu

²Московский физико-технический институт, strijov@ccas.ru

Примерами мультимоделей являются беггинг и градиентный бустинг [1], случайный лес [2]. Подход к мультимоделированию [3] предполагает, что вклад каждой модели в ответ зависит от рассматриваемого объекта. Смесь экспертов использует шлюзовую функцию, которая определяет значимость предсказания каждого эксперта — отдельной модели, входящей в смесь.

Для поиска оптимальных параметров мультимодели и локальных моделей рассматривается вероятностная постановка задачи. В качестве функционала качества рассматривается логарифм правдоподобия модели. Для оптимизации данного функционала рассматривается ЕМ-алгоритм [9].

Мультимоделей имеют ряд недостатков, которые связаны с тем, что сходимость локальных моделей сильно зависит от начальной инициализации векторов параметров. Для улучшения сходимости предлагается использовать априорные знания. В данной работе задается априорное распределения на веса локальных моделей, также предлагается использовать зависимость априорных распределений, для улучшения качества мультимодели.

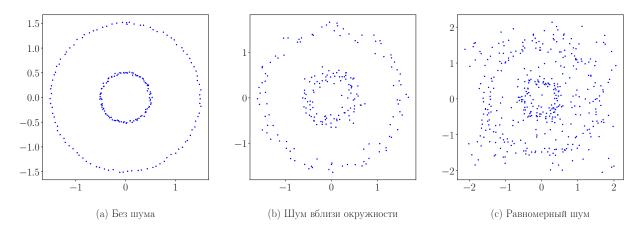


Рис. 1: Пример изображений с окружностями с разным уровнем шума: (a) окружности без шума; (b) окружности с зашумленным радиусом; (c) окружности с зашумленным радиусом, а также с равномерным шумом по всему изображению

Данная работа исследует зависимость качества модели в зависимости от выбора априорных распределений. Решается задача поиска окружностей на бинаризованном изображении. Предполагается, что радиусы окружностей различаются значимо, а также, что центры почти совпадают. Пример изображений показан на рис. 1. Предлагается рассмотреть как ведет себя модель с априорными знанием и без них в случае изображений с разным уровнем шума. В данной работе в качестве отдельных экспертов рассматриваются линейные модели — каждая модель отвечает своей окружности. В качестве шлюзовой функции рассматривается двухслойная нейронная сеть.

2 Работы по теме

Большое количество работ посвящены выбору шлюзовой функции: softmax—регрессия, процесс Дирихле [5], нейронная сеть [4] с функцией softmax на последнем слое.

Ряд работ посвящены выбору моделей в качестве отдельных экспертов. В работах [6, 10] в качестве модели эксперта рассматривается линейная модель. Работы [7, 8] рассматриваю модель SVM в качестве модели эксперта.

В работа [3] представлен обзор методов и моделей в задачах смеси экспертов. В данной работе представлен обзор выше перечисленных шлюзовых функций. Также в данной работе проведен анализ разных моделей, которые могут выступать в качестве локальной модели.

3 Постановка задачи нахождения параметров окружностей

Задано бинарное изображение:

$$\mathbf{M} \in \{0, 1\}^{m_1 \times m_2},\tag{3.1}$$

где 0 отвечает черной точке — изображения, 1 — белой точке фона.

По изображению \mathbf{M} строится выборка \mathbf{C} , элементами которой являются координаты x_i, y_i белых точек на картинке:

$$\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{N \times 2},\tag{3.2}$$

где N — число черных точек на изображении ${\bf M}$.

Обозначим x_0, y_0 — центр окружности, которую требуется найти на бинарном изображении \mathbf{M} , а r ее радиус. Элементы выборки $(x_i, y_i) \in \mathbf{C}$ являются геометрическим местом точек, которое заданно уравнение окружности:

$$(x_i - x_0)^2 + (y_i - y_0)^2 = r^2. (3.3)$$

Раскрыв скобки получим уравнение

$$(2x_0) \cdot x_i + (2y_0) \cdot y_i + (r^2 - x_0^2 - y_0^2) \cdot 1 = x_i^2 + y_i^2.$$
(3.4)

Получаем задачу линейной регрессии для нахождения параметров окружности:

$$\mathbf{X}\mathbf{w} \approx \mathbf{y}, \quad \mathbf{X} = \mathbf{C} \times \mathbf{1}, \quad \mathbf{y} = [x_1^2 + y_1^2, x_2^2 + y_2^2, \cdots, x_N^2 + y_N^2]^\mathsf{T},$$
 (3.5)

где найденые оптимальные параметры линейной регрессии $\mathbf{w} = [w_1, w_2, w_3]^\mathsf{T}$ восстанавливают параметры окружности:

$$x_0 = \frac{w_1}{2}, \quad y_0 = \frac{w_2}{2}, \quad r = \sqrt{w_3 + x_0^2 + y_0^2}.$$
 (3.6)

Решение уравнения (3.5) находит параметры единственной окружности на изображении. В случае, когда на изображении несколько окружностей, предлагается использовать мультимодель. В ее состав входят линейные модели Каждая линейная модель описывает одну окружность на изображении. В качестве мультимодели рассматривается смесь экспертов. Данная постановка обобщается на поиск параметров эллипсов в апендиксе A.

4 Постановка задачи построения смеси экспертов

Задана выборка из (3.5)

$$\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times n},\tag{4.1}$$

где N — число объектов в выборке, а n — размерность признакового пространства.

Определение 4.1. Смесь экспертов — мультимодель, определяющая правдоподобие веса π_k каждой локальной модели f_k на признаковом описании объекта x.

$$\hat{\mathbf{f}} = \sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathbf{f}_k, \qquad \pi_k \left(\mathbf{x}, \mathbf{V} \right) : \mathbb{R}^{n \times |\mathbf{V}|} \to [0, 1], \qquad \sum_{k=1}^{K} \pi_k \left(\mathbf{x}, \mathbf{V} \right) = 1$$
 (4.2)

где $\hat{\mathbf{f}}$ — мультимодель, а \mathbf{f}_k является некоторой моделью, π_k — параметрическая модель, \mathbf{w}_k — параметры k-й локальной модели, \mathbf{V} — параметры шлюзовой функции.

В данной работе в качестве локальных моделей \mathbf{f}_k и шлюзовой функции $\boldsymbol{\pi}$ рассматриваются следующие функции:

$$\mathbf{f}_{k}(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_{k}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}, \quad \boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}, \mathbf{V}) = \operatorname{softmax}(\mathbf{V}_{1}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{V}_{2}^{\mathsf{T}}\mathbf{x})),$$
 (4.3)

где $\mathbf{V} = ig[\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2 ig]$ — параметры шлюзовой функции.

В качестве функционала качества рассматривается правдоподобие модели:

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{W}|\mathbf{X}, \mathbf{V}) = \prod_{k=1}^{K} p^k(\mathbf{w}_k) \prod_{i=1}^{N} \left(\sum_{k=1}^{K} \pi_k p_k(y_i|\mathbf{w}_k, \mathbf{x}_i) \right),$$
(4.4)

где $\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \cdots, \mathbf{w}_K \end{bmatrix}^\mathsf{T}$

Получаем следующую задачу оптимизации:

$$\mathbf{W}, \mathbf{V} = \arg \max_{\mathbf{W}, \mathbf{V}} p(\mathbf{y}, \mathbf{W} | \mathbf{X}, \mathbf{V})$$
(4.5)

5 ЕМ-алгоритм для решения задачи смеси экспертов

Рассмотрим следующую вероятностную постановку задачи:

1.
$$p_k(y_i|\mathbf{w}_k, \mathbf{x}_i) = \mathcal{N}(y_i|\mathbf{w}_k^\mathsf{T}\mathbf{x}_i, \beta^{-1})$$

2.
$$p^k(\mathbf{w}_k) = \mathcal{N}(\mathbf{w}_k | \mathbf{w}_k^0, \mathbf{A}_k)$$

3. $p(\boldsymbol{\varepsilon}_{k,k'}|\boldsymbol{\alpha}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{\varepsilon}_{k,k'}|\mathbf{0},\hat{\boldsymbol{\alpha}})$, где $\boldsymbol{\varepsilon}_{k,k'} = \mathbf{w}_k^0 - \mathbf{w}_{k'}^0$, $\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \operatorname{diag}(\boldsymbol{\alpha})$ — диагональная матрица, диагональ которой равняется $\boldsymbol{\alpha}$.

Тогда правдоподобия модели (4.4) переписывается в следующем виде:

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{W}|\mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \mathbf{W}^{0}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}, \beta) = \prod_{k,k'=1}^{K} \mathcal{N}\left(\boldsymbol{\varepsilon}_{k,k'}|\mathbf{0}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}\right) \cdot \prod_{k=1}^{K} \mathcal{N}\left(\mathbf{w}_{k}|\mathbf{w}_{k}^{0}, \mathbf{A}_{k}\right) \prod_{i=1}^{N} \left(\sum_{k=1}^{K} \pi_{k} \mathcal{N}\left(y_{i}|\mathbf{w}_{k}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_{i}, \beta^{-1}\right)\right),$$

$$(5.1)$$

где $\mathbf{A} = [\mathbf{A}_1, \cdots, \mathbf{A}_K]$

Для решения задачи (4.5) в условиях правдоподобия (5.1) введем матрицу скрытых переменных **Z**, где $z_{ik} = 1$, если *i*-й объект порожден моделью k и $z_{ik} = 0$ иначе. Используя **Z**, логарифм правдоподобие (5.1) переписывается следующим образом:

$$\log p(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \mathbf{W} | \mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \mathbf{W}^{0}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}, \beta) =$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} z_{ik} \left[\log \pi_{k} \left(\mathbf{x}_{i}, \mathbf{V} \right) - \frac{\beta}{2} \left(y_{i} - \mathbf{w}_{k}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{i} \right)^{2} + \frac{1}{2} \log \frac{\beta}{2\pi} \right] +$$

$$+ \sum_{k=1}^{K} \left[-\frac{1}{2} \left(\mathbf{w}_{k} - \mathbf{w}_{k}^{0} \right)^{\mathsf{T}} \mathbf{A}_{k}^{-1} \left(\mathbf{w}_{k} - \mathbf{w}_{k}^{0} \right) + \frac{1}{2} \log \det \mathbf{A}_{k}^{-1} - \frac{n}{2} \log 2\pi \right] +$$

$$+ \sum_{k=1}^{K} \sum_{k'=1}^{K} \left[-\frac{1}{2} \left(\mathbf{w}_{k}^{0} - \mathbf{w}_{k'}^{0} \right)^{\mathsf{T}} \hat{\boldsymbol{\alpha}}^{-1} \left(\mathbf{w}_{k}^{0} - \mathbf{w}_{k'}^{0} \right) + \frac{1}{2} \log \det \hat{\boldsymbol{\alpha}} - \frac{n}{2} \log 2\pi \right].$$

$$(5.2)$$

С учетом (5.2) задача оптимизации (4.5) принимает вид:

$$\mathbf{W}, \mathbf{Z}, \mathbf{V}, \mathbf{W}^{0}, \mathbf{A}, \beta = \arg \max_{\mathbf{W}, \mathbf{Z}, \mathbf{V}, \mathbf{W}^{0}, \mathbf{A}, \beta} \log p(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \mathbf{W} | \mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \mathbf{W}^{0}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}, \beta)$$
(5.3)

Для поиска локального минимума в задаче оптимизации (5.3) воспользуемся ЕМалгоритмом.

 \mathbf{E} — $\mathbf{step.}$ Найдем $q\left(\mathbf{Z},\mathbf{W}\right)=q\left(\mathbf{Z}\right)q\left(\mathbf{W}\right)$ найболее близкое к $p\left(\mathbf{Z},\mathbf{W}|\mathbf{y},\mathbf{X},\mathbf{V},\mathbf{A},\mathbf{W}^{0},\hat{\boldsymbol{lpha}},eta
ight).$

$$\log q\left(\mathbf{Z}\right) = \mathsf{E}_{q/\mathbf{Z}} \log p\left(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \mathbf{W} | \mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \mathbf{W}^{0}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}, \boldsymbol{\beta}\right) \propto$$

$$\propto \sum_{i+1}^{N} \sum_{k=1}^{K} z_{ik} \left[\log \pi_{k}\left(\mathbf{x}_{i}, \mathbf{V}\right) - \frac{\beta}{2}\left(y_{i}^{2} - \mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \mathsf{E} \mathbf{w}_{k} + \mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \mathsf{E} \mathbf{w}_{k} \mathbf{w}_{k}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{i}\right) + \frac{1}{2} \log \frac{\beta}{2\pi}\right]$$

$$p\left(z_{ik} = 1\right) = \frac{\exp\left(\log \pi_{k}\left(\mathbf{x}_{i}, \mathbf{V}\right) - \frac{\beta}{2}\left(\mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \mathsf{E} \mathbf{w}_{k} \mathbf{w}_{k}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \mathsf{E} \mathbf{w}_{k}\right)\right)}{\sum_{k'=1}^{K} \exp\left(\log \pi_{k'}\left(\mathbf{x}_{i}, \mathbf{V}\right) - \frac{\beta}{2}\left(\mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \mathsf{E} \mathbf{w}_{k'} \mathbf{w}_{k'}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \mathsf{E} \mathbf{w}_{k'}\right)\right)}$$

$$(5.4)$$

Получаем, что параметр $q(z_{ik})$ является Бернулевской случайной величиной с параметров заданным в выражении (5.4).

$$\log q\left(\mathbf{W}\right) = \mathsf{E}_{q/\mathbf{W}} \log p\left(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \mathbf{W} | \mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \mathbf{W}^{0}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}, \beta\right) \propto$$

$$\propto \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} \mathsf{E} z_{ik} \left[\log \pi_{k} \left(\mathbf{x}_{i,\mathbf{V}} \right) - \frac{\beta}{2} \left(y_{i} - \mathbf{w}_{k}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{i} \right)^{2} + \frac{1}{2} \log \frac{\beta}{2\pi} \right] +$$

$$+ \sum_{k=1}^{K} \left[-\frac{1}{2} \left(\mathbf{w}_{k} - \mathbf{w}_{k}^{0} \right)^{\mathsf{T}} \mathbf{A}_{k}^{-1} \left(\mathbf{w}_{k} - \mathbf{w}_{k}^{0} \right) + \frac{1}{2} \log \det \mathbf{A}_{k}^{-1} - \frac{n}{2} \log 2\pi \right]$$

$$\propto \sum_{k=1}^{K} \left[\mathbf{w}_{k}^{\mathsf{T}} \left(\mathbf{A}_{k}^{-1} \mathbf{w}_{k}^{0} + \beta \sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_{i} y_{i} \mathsf{E} z_{ik} \right) - \frac{1}{2} \mathbf{w}_{k}^{\mathsf{T}} \left(\mathbf{A}_{k}^{-1} + \beta \sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_{i} \mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \right) \mathbf{w}_{k} \right]$$

$$(5.5)$$

Получаем, что распределение $q(\mathbf{w}_k) = \mathcal{N}(\mathbf{w}_k | \mathbf{m}_k, \mathbf{B}_k)$, где параметры $\mathbf{m}_k, \mathbf{B}_k$ определяются следующим образом:

$$\mathbf{m}_{k} = \mathbf{B}_{k} \left(\mathbf{A}_{k}^{-1} \mathbf{w}_{k}^{0} + \beta \sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_{i} y_{i} \mathsf{E} z_{ik} \right) \qquad \mathbf{B}_{k} = \left(\mathbf{A}_{k}^{-1} + \beta \sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_{i} \mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \mathsf{E} z_{ik} \right)^{-1}$$
(5.6)

 $\mathbf{M}\mathbf{-step.}\quad \mathsf{Haйдem}\ \mathbf{V},\mathbf{W}^0,\mathbf{A},\boldsymbol{\beta}\ \mathsf{из}\ \mathsf{максимизации}\ \mathsf{E}_q\log p\big(\mathbf{y},\mathbf{Z},\mathbf{W}|\mathbf{X},\mathbf{V},\mathbf{A},\mathbf{W}^0,\hat{\boldsymbol{\alpha}},\boldsymbol{\beta}\big).$

$$\mathcal{F}\left(\mathbf{V}, \mathbf{W}^{0}, \mathbf{A}, \beta\right) = \mathsf{E}_{q} \log p\left(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \mathbf{W} | \mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \mathbf{W}^{0}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}, \beta\right) =$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} \mathsf{E} z_{ik} \left[\log \pi_{k} \left(\mathbf{x}_{i}, \mathbf{V}\right) - \frac{\beta}{2} \mathsf{E} \left(y_{i} - \mathbf{w}_{k}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{i}\right)^{2} + \frac{1}{2} \log \frac{\beta}{2\pi} \right] +$$

$$+ \sum_{k=1}^{K} \left[-\frac{1}{2} \mathsf{E} \left(\mathbf{w}_{k} - \mathbf{w}_{k}^{0}\right)^{\mathsf{T}} \mathbf{A}_{k}^{-1} \left(\mathbf{w}_{k} - \mathbf{w}_{k}^{0}\right) + \frac{1}{2} \log \det \mathbf{A}_{k}^{-1} - \frac{n}{2} \log 2\pi \right] +$$

$$+ \sum_{k=1}^{K} \sum_{k'=1}^{K} \left[-\frac{1}{2} \left(\mathbf{w}_{k}^{0} - \mathbf{w}_{k'}^{0}\right)^{\mathsf{T}} \hat{\boldsymbol{\alpha}}^{-1} \left(\mathbf{w}_{k}^{0} - \mathbf{w}_{k'}^{0}\right) + \frac{1}{2} \log \det \hat{\boldsymbol{\alpha}} - \frac{n}{2} \log 2\pi \right].$$

$$(5.7)$$

Так-как $\mathcal{F}(\mathbf{V}, \mathbf{W}^0, \mathbf{A}, \beta)$ является вогнутой, то для нахождения оптимальных параметров воспользуемся условием первого порядка.

$$\frac{\partial \mathcal{F}\left(\mathbf{V}, \mathbf{W}^{0}, \mathbf{A}, \beta\right)}{\partial \mathbf{V}} = 0 \tag{5.8}$$

Решение уравнения (5.8) найдем при помощи градиентного метода оптимизации, которое гарантирует сходимость к локальному экстремуму функции $\mathcal{F}(\mathbf{V}, \mathbf{W}^0, \mathbf{A}, \beta)$.

$$\frac{\partial \mathcal{F}\left(\mathbf{V}, \mathbf{W}^{0}, \mathbf{A}, \beta\right)}{\partial \mathbf{A}_{k}^{-1}} = \frac{1}{2} \mathbf{A}_{k} - \frac{1}{2} \mathsf{E}\left(\mathbf{w}_{k} - \mathbf{w}_{k}^{0}\right) \left(\mathbf{w}_{k} - \mathbf{w}_{k}^{0}\right)^{T} = 0$$

$$\mathbf{A}_{k} = \mathsf{E}\mathbf{w}_{k} \mathbf{w}_{k}^{\mathsf{T}} - \mathbf{w}_{k}^{0} \mathsf{E}\mathbf{w}_{k}^{\mathsf{T}} - \mathsf{E}\mathbf{w}_{k} \mathbf{w}_{k}^{0\mathsf{T}} + \mathbf{w}_{k}^{0} \mathbf{w}_{k}^{0\mathsf{T}}$$
(5.9)

$$\frac{\partial \mathcal{F}\left(\mathbf{V}, \mathbf{W}^{0}, \mathbf{A}, \beta\right)}{\partial \beta} = \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{1}{\beta} \mathsf{E} z_{ik} - \frac{1}{2} \mathsf{E} z_{ik} \left[y_{i}^{2} - 2y_{i} \mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \mathsf{E} \mathbf{w}_{k} + \mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \mathbf{w}_{k} \mathbf{w}_{k}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{i} \right] \right) = 0$$

$$\frac{1}{\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} \left[y_{i}^{2} - 2y_{i} \mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \mathsf{E} \mathbf{w}_{k} + \mathbf{x}_{i}^{\mathsf{T}} \mathsf{E} \mathbf{w}_{k} \mathbf{w}_{k}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_{i} \right] \mathsf{E} z_{ik} \tag{5.10}$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}\left(\mathbf{V}, \mathbf{W}^{0}, \mathbf{A}, \beta\right)}{\partial \mathbf{w}_{k}^{0}} = \mathbf{A}_{k}^{-1} \left(\mathsf{E} \mathbf{w}_{k} - \mathbf{w}_{k}^{0} \right) + \hat{\boldsymbol{\alpha}} \sum_{k'=1}^{K} \left[\mathbf{w}_{k'}^{0} - \mathbf{w}_{k}^{0} \right] = 0$$

$$\mathbf{w}_{k}^{0} = \left[\mathbf{A}_{k}^{-1} + (K - 1) \hat{\boldsymbol{\alpha}} \right]^{-1} \left(\mathbf{A}_{k}^{-1} \mathsf{E} \mathbf{w}_{k} + \hat{\boldsymbol{\alpha}} \sum_{k'=1, \ k' \neq k}^{K} \mathbf{w}_{k'}^{0} \right).$$
(5.11)

Используя формулы (5.4-5.11) получаем итеративный процесс, который сходится к локальному решению (5.3).

Если в списке вероятностных предположений оставить только пункт (1.) получим решение задачи оптимизации, когда не задано никаких априорных распределений на модели. В случае, когда рассматриваются пункты (1., 2.) получим задачу с заданными априорными распределениями на локальные модели. В случае, когда рассматриваются все пункты (1., 2., 3.) назовем решение с регуляризацией априорных распределений, так как в данном случае мы учитываем зависимость между локальными моделями.

6 Вычислительный эксперимент

Проводится вычислительный эксперимент для анализа качества нахождения окружностей. В эксперименте рассматривается мультимодель без задания априорных распределений на параметры модели, которую обозначим \mathfrak{M}_1 , мультимодель \mathfrak{M}_2 с заданным априорным распределением (6.3) на параметры локальных моделей, также рассматривается мультимодель \mathfrak{M}_3 с регуляризацией априорных распределений. Качество прогноза модели \mathfrak{M}_i окружностей определяется функцией:

$$S_{\mathfrak{M}_{i}} = \sum_{k=1}^{K} (x_{0}^{k} - x_{pr}^{k})^{2} + (y_{0}^{k} - y_{pr}^{k})^{2} + (r^{k} - r_{pr}^{k})^{2}, \tag{6.1}$$

где x_0^k, y_0^k, r^k — истинные значения центра и радиуса k-й окружности, $x_{pr}^k, y_{pr}^k, r_{pr}^k$ — предсказанные значения центра и радиуса k-й окружности.

Качество модели оценивается правдоподобием модели без учета априорного распределения:

$$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{W}, \mathbf{X}, \mathbf{V}, \beta) = \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{N} \pi_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{V}) \left[-\frac{\beta}{2} \left(y_i - \mathbf{w}^\mathsf{T} \mathbf{x}_i \right)^2 - \frac{1}{2} \log 2\pi + \frac{1}{2} \log \beta \right]. \quad (6.2)$$

Априорные распределения на параметры локальных моделей в эксперименте было задано следующим образом:

$$\mathcal{N}\left(\mathbf{w}_{1}|\mathbf{w}_{1}^{0},\mathbf{I}\right), \quad \mathcal{N}\left(\mathbf{w}_{2}|\mathbf{w}_{2}^{0},\mathbf{I}\right),$$
 (6.3)

где $\mathbf{w}_1^0 = [0,0,0.1], \ \mathbf{w}_2^0 = [0,0,2],$ что указывает на концентричность окружностей и на различность радиусов.

Синтетические данные с разным типом шума. Для сравнения качества работы мультимоделей $\mathfrak{M}_1, \mathfrak{M}_2, \mathfrak{M}_3$ смеси экспертов с разными начальными предположениями был проведен вычислительный эксперимент на синтетических данных.

Вычислительный эксперимент проводится на синтетических выборках, которые получена при помощи генерации двух концентрических окружностей с разным уровнем шума. Выборка Synthetic 1 — выборка без шума, Synthetic 2 — выборка с шумом вблизи окружности, Synthetic 3 — выборка с шумом вблизи окружности, а также с равномерным шумом по всему изображению.

На рис. 2 показан случайный результаты работы мультимоделей $\mathfrak{M}_1, \mathfrak{M}_2, \mathfrak{M}_3$. На всех изображениях обе модели обучались 50 итераций ЕМ-алгоритма. Мультимодели $\mathfrak{M}_2, \mathfrak{M}_3$ работают лучше мультимодели \mathfrak{M}_1 , так как они восстанавливают окружности лучше. Качество прогноза посчитанное по формуле (6.1) представлены в табл. 1.

Таблица 1: Результаты работы мультимоделей на синтетических выборках

Выборка	$\mathcal{S}_{\mathfrak{M}_1}$	$\mathcal{S}_{\mathfrak{M}_2}$	$\mathcal{S}_{\mathfrak{M}_3}$
Synthetic 1	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
Synthetic 2	0.6	10^{-3}	10^{-3}
Synthetic 3	0.6	10^{-3}	10^{-3}

Процесс обучения на синтетических данных. Проведен вычислительный эксперимент, для анализа свойств мультимоделей $\mathfrak{M}_1, \mathfrak{M}_2, \mathfrak{M}_3$ во время обучения. В качестве данных рассматривалась синтетическая выборка Synthetic 3.

На рис. З показана зависимость радиуса и центра окружности в зависимости от номера итерации. Мультимодель \mathfrak{M}_2 с априорным распределеним находит центры и радиусы окружностей в среднем лучше чем мультимодель \mathfrak{M}_1 без задания априорного распределения. Мультимодель \mathfrak{M}_3 с заданием регуляризатора является более устойчивой, чем мультимодель \mathfrak{M}_2 , так как дисперсия восстановленных центров и радиуса окружностей меньше.

На рис. 4 показана зависимость правдоподобия мультимодели (6.2) от номера итерации ЕМ-алгоритма. Правдоподобие модели на начальных этапах ЕМ-алгоритма растет быстрее в случае мультимоделей $\mathfrak{M}_2, \mathfrak{M}_3$ чем в мультимодели \mathfrak{M}_1 . После 20-й итерации все мультимодели имеют одинаковое правдоподобие.

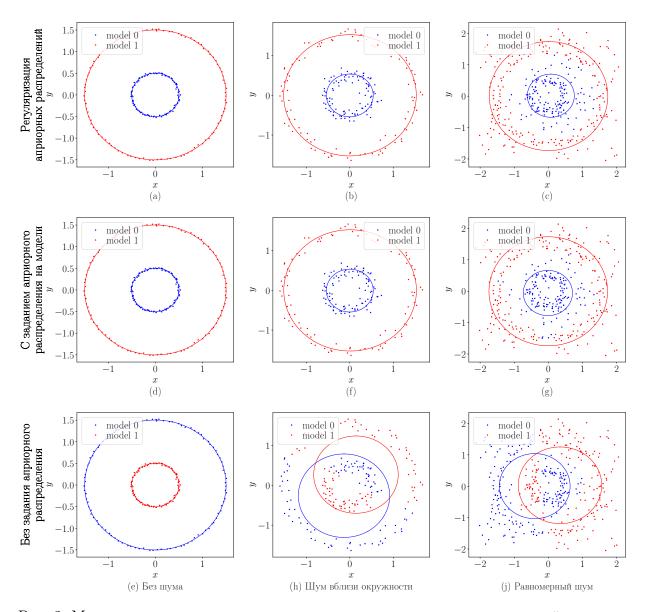


Рис. 2: Мультимодель в зависимости от разных априорных предположений и в зависимости от разного уровня шума: (a)–(c) модель с регуляризаций априорных распределений; (d)–(g) модель с заданными априорными распределениями на параметрах локальных моделей; (e)–(j) модель без заданных априорных предположений

На рис. 5-7 показан процесс обучения смеси экспертов для разных мультимоделей. На рис. 7 проиллюстрирована работа ЕМ-алгоритма для мультимодели \mathfrak{M}_1 , которая не находит окружности верно. Иллюстрация работы ЕМ-алгоритма для мультимоделей $\mathfrak{M}_2, \mathfrak{M}_3$ показана на рис. 5-6. Мультимодели $\mathfrak{M}_2, \mathfrak{M}_3$ находят обе окружности на изображении.

В ходе данного эксперимента показано, что задание априорных распределений

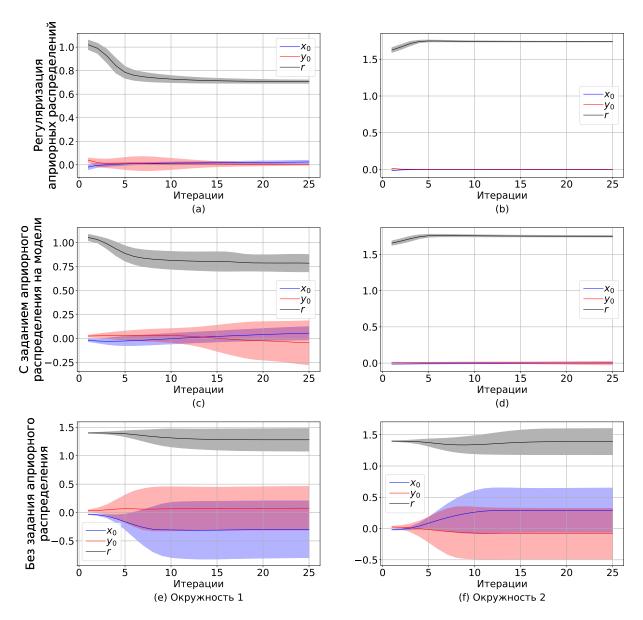


Рис. 3: График зависимости центра и радиуса окружностей от номера итерации: (a)—(b) модель с регуляризацией априорных распределений; (c)—(d) модель с заданными априорными распределениями на параметры моделей; (e)—(f) модель без задания априорных распределений

улучшает качество мультимодели, позволяя находить нужные окружности в среднем лучше, чем мультимодель без заданого априорного распределения на параметрах ло-кальных моделей. Задание регуляризации априорных распределений позволяет улучшить устойчивость мультимодели, так как дисперсия центра и радиуса окружностей становится меньше. Также в эксперименте показано, что хоть и правдоподобие модели (4) для разных мультимоделей одинаковое, но качество предсказание окружностей

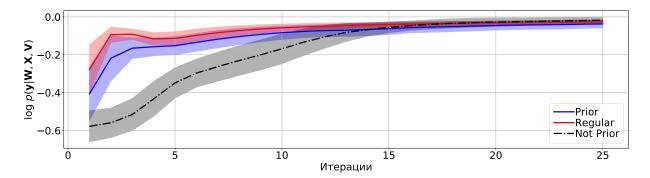


Рис. 4: График зависимости логарифма правдоподобия модели от номера итерации EM-алгорима

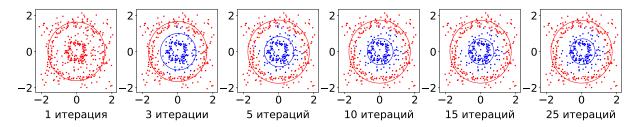


Рис. 5: Визуализация процесса обучения для мультимодели с заданной регуляризацией: от 1й итерации до 25й итерации

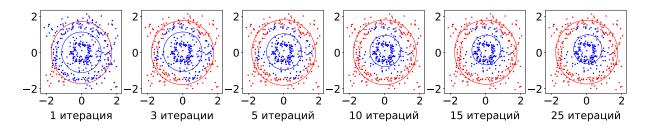


Рис. 6: Визуализация процесса обучения для мультимодели с заданным априорным распределением на параметрах локальных моделей: от 1й итерации до 25й итерации

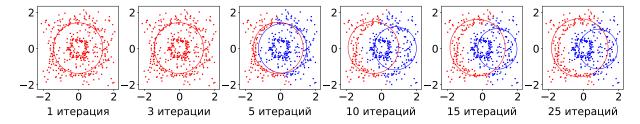


Рис. 7: Визуализация процесса обучения для мультимодели баз заданных априорных распределений: от 1й итерации до 25й итерации

разных мультимоделей является разным. В случае задания априорного распределения качество нахождения окружностей является лучше.

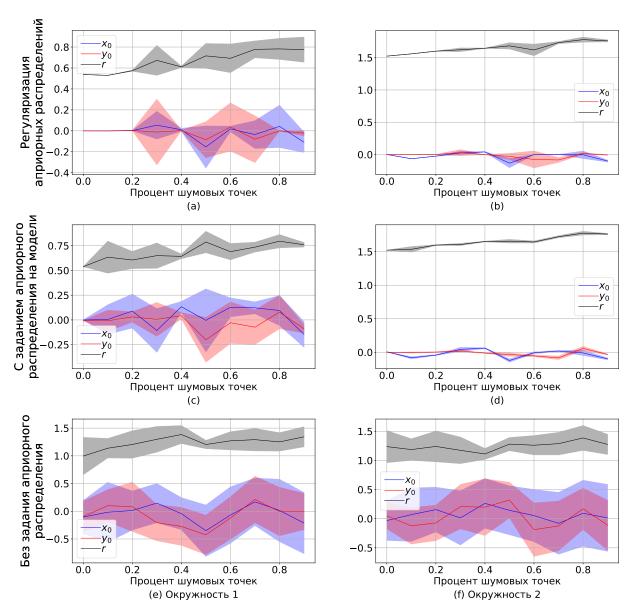


Рис. 8: График зависимости центра и радиуса окружностей от номера итерации: (a)—(b) модель с регуляризацией априорных распределений; (c)—(d) модель с заданными априорными распределениями на параметры моделей; (e)—(f) модель без задания априорных распределений

Анализ мультимоделей в зависимости от уровня шума. Проведен вычислительный эксперимент, для анализа свойств мультимоделей $\mathfrak{M}_1, \mathfrak{M}_2, \mathfrak{M}_3$ от уровня зашумленности. В качестве данных рассматривалась синтетическая выборка Synthetic 1

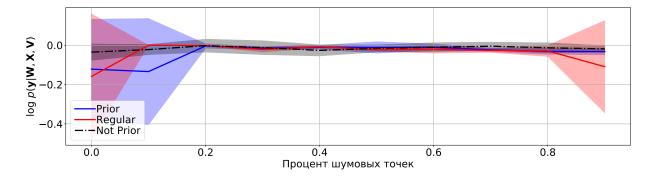


Рис. 9: График зависимости логарифма правдоподобия от уровня шума

с добавлением к ней разного уровня шума. Минимальный уровень шума равен 0, когда нету шумовых точек, а максимальный уровень шума равен 1, когда число шумовых точек равно числу точек обоих окружностей.

На рис. 8 показан график зависимости центра (x_0, y_0) и радиуса r окружностей от уровня шума. Видно, что радиус окружностей растет при увеличении уровня шума. Центры окружностей модели \mathfrak{M}_2 , \mathfrak{M}_3 в среднем находят верно, но модель с регуляризацией \mathfrak{M}_3 имеет меньшую дисперсию. Модель \mathfrak{M}_1 имеет худший результат, так как имеет большую дисперсию по всем элементам: x_0, y_0, r .

На рис. 9 показан график зависимости логарифма правдоподобия модели (6.2). Видно, что все модели имеют одинаковое правдоподобие модели, но как показано на рис. 8 качество предсказание окружностей у разных моделей различается.

В данной части эксперимента показано, что наиболее устойчивой является модель \mathfrak{M}_3 с регуляризацией априорных распределений.

Реальные данные. Проведен эксперимент на реальной выборке. В качестве данных рассматривались глаза, а точнее их предобработаное бинарное изображение с выделенными границами радужки и роговицы. Проводится анализ качества предсказания моделей $\mathfrak{M}_1, \mathfrak{M}_2, \mathfrak{M}_3$.

На рис. 10 показан результат работы разных мультимоделей. Мультимодель \mathfrak{M}_1 не верно находит меньшую окружность. Мультимодели $\mathfrak{M}_2, \mathfrak{M}_3$ одинаково хорошо находят обе окружности.

На рис. 11-13 показан процесс оптимизации мультимоделей. Показано изменение предсказания окружностей мультимоделями в процессе обучения. На рис. 11 показан процесс оптимизации параметров для мультимодели \mathfrak{M}_1 без априорных знаний. На рис. 12 показан процесс оптимизации параметров для мультимодели \mathfrak{M}_2 , в которой задано априорное распределение на параметры локальных моделей. На рис. 13 показан процесс оптимизации параметров для мультимодели \mathfrak{M}_3 с регуляризацией априорных распределений на параметрах локальных моделей.

В данной части эксперимента показано, что на реальных данных мультимодели $\mathfrak{M}_2, \mathfrak{M}_3$ с заданными априорными распределениями и регуляризацией являются

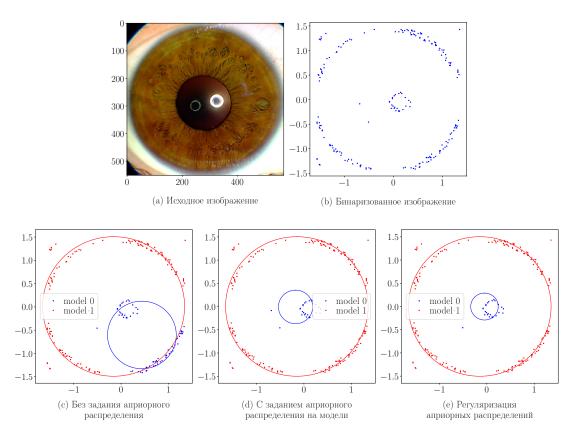


Рис. 10: Мультимодель в зависимости от разных априорных предположений на реальном изображении: (а) исходное изображение; (b) бинаризованое изображение; (c) мультимодель без априорных предположений; (d) мультимодель с априорными распределениями на параметрах локальных моделей; (e) мультимодель с регуляризаций на априорных распределениях параметров локальных моделей

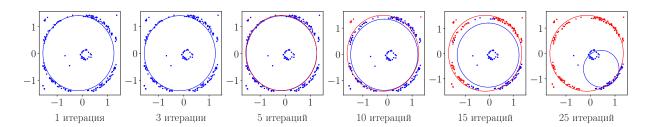


Рис. 11: Визуализация процесса обучения для мультимодели без априорных предположений: от 1й итерации до 15й итерации

более точными в определении окружностей чем мультимодель \mathfrak{M}_2 без априорных распределений.

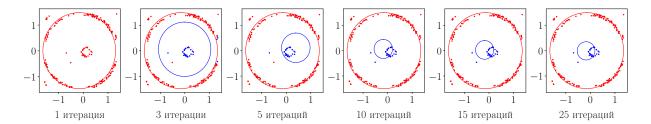


Рис. 12: Визуализация процесса обучения для мультимодели с априорным распределением на параметрах локальных моделей: от 1й итерации до 15й итерации

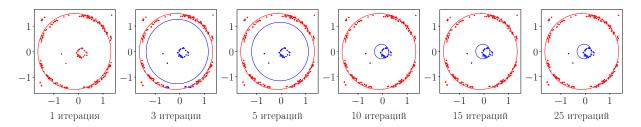


Рис. 13: Визуализация процесса обучения для мультимодели с заданной регуляризацией: от 1й итерации до 15й итерации

7 Заключение

В данной работе проведено сравнение мультимоделей в случае, когда было задано априорное распределение параметров каждой модели внутри мультимодели и в случае, когда априорного распределения не было. В качестве данных использовались изображения концентрических окружностей с разным уровнем шума. Для поиска окружностей использовались линейные модели. В качестве шлюзовой функции использовалась двухслойная нейросеть.

Как показано в эксперименте в случае, когда введены априорные знания на линейные модели, мультимодель является более точной, так как вернее находит окружности на изображениях.

Также был проведен эксперимент по заданию регуляризации на априорные распределения параметров локальных моделей. В эксперименте показано, что в случае, когда регуляризация задана мультимодель находит окружности более устойчиво.

В ходе эксперимента было показано, что модель, которая рассматривалась в работе является чувствительной к выбросам. Для решения данной проблемы предлагается рассматривать не только локальные модели, которые описывают окружности, но также и модели, которые описывают шум.

В дальнейшем планируется улучшить мультимодель при помощи задания априорного распределения на шлюзовую функцию. Планируется рассмотреть в качестве моделей не только модели, которые описывают данные, а также модель, которая отвечает за шум в данных. Предполагается, что вероятность шума мала, поэтому важно задать априорного распределение, которое учитывало бы этот факт.

Список литературы

- [1] Chen Tianqi, Guestrin Carlos XGBoost: A Scalable Tree Boosting System // KDD '16 Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. 2016.
- [2] Chen Xi, Ishwaran Hemant Random Forests for Genomic Data Analysis // Genomics. 2012. Issues. 99, No 6. pp. 323–329.
- [3] Yuksel Seniha Esen, Wilson Joseph N., Gader Paul D Twenty Years of Mixture of Experts // IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems. 2012. Issues. 23, No 8. pp. 1177–1193.
- [4] Noam Shazeer, Azalia Mirhoseini, Krzysztof Maziarz Outrageously large neural networks: the sparsely-gated mixture-of-experts layer // ICLR, 2017.
- [5] Rasmussen Carl Edward, Ghahramani Zoubin Infinite Mixtures of Gaussian Process Experts // Advances in Neural Information Processing Systems 14. 2002. pp. 881–888.
- [6] M. I. Jordan Hierarchical mixtures of experts and the EM algorithm // Neural Comput., vol. 6, no. 2, pp. 181–214, 1994.
- [7] C. A. M. Lima, A. L. V. Coelho, F. J. Von Zuben Hybridizing mixtures of experts with support vector machines: Investigation into nonlinear dynamic systems identification // Inf. Sci., vol. 177, no. 10, pp. 2049–2074, 2007.
- [8] L. Cao Support vector machines experts for time series forecasting // Neurocomputing, vol. 51, pp. 321–339, Apr. 2003.
- [9] A. P. Dempster, N. M. Laird and D. B. Rubin Maximum Likelihood from Incomplete Data via the EM Algorithm // Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological), Vol. 39, No. 1 pp. 1-38, 1977.
- [10] M. I. Jordan, R. A. Jacobs Hierarchies of adaptive experts // in Advances in Neural Information Processing Systems. Cambridge, MA: MIT Press, 1991, pp. 985–992.

А Постановка задачи нахождения параметров эллипca

Задано бинарное изображение:

$$\mathbf{M} \in \{0, 1\}^{m_1 \times m_2},\tag{A.1}$$

где 0 отвечает черной точке — изображения, 1 — белой точке фона.

По изображению \mathbf{M} строится выборка \mathbf{C} , элементами которой являются координаты x_i, y_i белых точек на картинке:

$$\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{N \times 2},\tag{A.2}$$

где N — число черных точек на изображении ${\bf M}$.

Обозначим x_0, y_0 — центр эллипса, который требуется найти на бинарном изображении \mathbf{M} , а a, b его коэффициенты вдоль координат. Элементы выборки $(x_i, y_i) \in \mathbf{C}$ являются геометрическим местом точек, которое заданно уравнением эллипса:

$$(x_i - x_0)^2 + \frac{a^2}{b^2} (y_i - y_0)^2 = a^2.$$
(A.3)

Раскрыв скобки получим уравнение

$$(2x_0) \cdot x_i + \left(\frac{2y_0a^2}{b^2}\right) \cdot y_i + \left(-\frac{a^2}{b^2}\right)y_i^2 + \left(a^2 - x_0^2 - \frac{a^2}{b^2}y_0^2\right) \cdot 1 = x_i^2.$$
 (A.4)

Получаем задачу линейной регрессии для нахождения параметров окружности:

$$\mathbf{X}\mathbf{w} \approx \mathbf{y}, \quad \mathbf{X} = \operatorname{concat} \left[\mathbf{C}, \left[y_1^2, y_2^2, \cdots, y_N^2 \right]^\mathsf{T}, \mathbf{1} \right], \quad \mathbf{y} = \left[x_1^2, x_2^2, \cdots, x_N^2 \right]^\mathsf{T},$$
 (A.5)

где найденые оптимальные параметры линейной регрессии $\mathbf{w} = [w_1, w_2, w_3, w_4]^\mathsf{T}$ восстанавливают параметры окружности:

$$x_0 = \frac{w_1}{2}, \quad y_0 = -\frac{w_2}{2w_3}, \quad a^2 = w_4 - \frac{w_1}{2} - \frac{w_2^2}{4w_3}, \quad b^2 = -\frac{1}{w_3} \left(w_4 - \frac{w_1}{2} - \frac{w_2^2}{4w_3} \right).$$
 (A.6)

Решение уравнения (А.5) находит параметры единственного эллипса на изображении.