Смеси экспертов

Грабовой Андрей Валериевич

Московский физико-технический институт

МФТИ, г. Долгопрудный

План

1. EM–алгоритм:
   - Классический,
   - Вариационный,
2. Смесь моделей:
   - Постановка задачи,
   - Итерационные формулы полученные при помощи вариационного EM–алгоритма,
   - Илюстрация сходимости,
3. Смесь экспертов
   - Постановка задачи,
   - Итерационные формулы полученные при помощи вариационного EM–алгоритма,
   - Илюстрация сходимости,

Максимизация обоснованости:

$$\boldsymbol{\Theta} = \arg\max_{\boldsymbol{\Theta}} p\left(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\Theta}\right) \tag{1}$$

ELBO:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}\left(q(\mathbf{Z}), \boldsymbol{\Theta}\right) &= \int q(\mathbf{Z}) \log \frac{p\left(\mathbf{y}, \mathbf{Z}|\boldsymbol{\Theta}, \mathbf{X}\right)}{q\left(\mathbf{Z}\right)} d\mathbf{Z} \\ &= p\left(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\Theta}\right) - \mathsf{D}_{KL}\left(q(\mathbf{Z})||p(\mathbf{Z}|\mathbf{y}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\Theta})\right)\end{aligned} \tag{2}$$

EM–алгоритм:

1. E–шаг:

$$q^{s}\left(\mathbf{Z}\right) = \arg\max_{q(\mathbf{Z})\in Q} \mathcal{L}\left(q(\mathbf{Z}), \boldsymbol{\Theta}^{s-1}\right) \tag{3}$$

2. M–шаг:

$$\boldsymbol{\Theta}^{s} = \arg\max_{\boldsymbol{\Theta}} \mathcal{L}\left(q^{s}\left(\mathbf{Z}\right), \boldsymbol{\Theta}\right) \tag{4}$$

Вариационный EM–алгоритм (Mean Field Approximation[1]):

1. E–шаг:

$$\log q\left(\mathbf{Z}_k^s\right) \propto \mathsf{E}_{q/k} \log p\left(\mathbf{y}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\Theta}^{s-1}\right) \tag{5}$$

2. M–шаг:

$$\boldsymbol{\Theta}^{s} = \arg\max_{\boldsymbol{\Theta}} \mathbf{E}_{q^s} \log p\left(\mathbf{y}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\Theta}\right) \tag{6}$$

[1] `https://github.com/andriygav/EMprior/blob/master/Lecture/Grabovoy2019MeanField.pdf`

Definition

Смесь моделей — мультимодель, ответы которой представляют собой взвешенную сумму ответов всех задействованных моделей независимо от объекта.

$$\hat{\mathbf{f}} = \sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathbf{f}_k, \qquad \pi_k = const, \quad \sum_{k=1}^{K} \pi_k = 1, \tag{7}$$

где $\mathbf{f}$ — мультимодель, а $\mathbf{f}_k$ — локальная модель.

Пример 1:

1. Веса моделей в смеси $\boldsymbol{\pi}$ получены из априорного распределения
$$p\left(\boldsymbol{\pi}|\mu\right); \tag{8}$$
2. Вектора параметров $\mathbf{w}_k$ получены из нормального распределения
$$p\left(\mathbf{w}_k|\mathbf{A}_k\right) = \mathcal{N}\left(\mathbf{w}_k|\mathbf{0}, \mathbf{A}_k\right), \; k = 1, \cdots K; \tag{9}$$
3. Для каждого объекта $\mathbf{x}_i$ существует модель $\mathbf{f}_{k_i}$, которой он описывается, причем $p\left(k_i = k\right) = \pi_k$;
4. Для каждого объекта $\mathbf{x}_i$ класс y_i определен в соответсвии с моделью
$$\mathbf{f}_{k_i} : \; y_i \sim \; \mathcal{N}\left(\mathbf{w}_{k_i}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i + b_k, \beta^{-1}\right) \tag{10}$$

Правдоподобие модели:

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \beta, \boldsymbol{\mu}) = \text{Dir}(\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{\mu}) \prod_{k=1}^{K} N(\mathbf{w}_k|\mathbf{0}, \mathbf{A}_k) \prod_{i=1}^{N} \left(\sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}(y_i|\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i, \beta^{-1}) \right) \tag{11}$$

Введем скрытые переменные $\mathbf{Z} = ||z_{ik}||$, где $z_{ik} = 1 \Leftrightarrow k_i = k$:

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \beta, \boldsymbol{\mu}) = \text{Dir}(\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{\mu}) \prod_{k=1}^{K} N(\mathbf{w}_k|\mathbf{0}, \mathbf{A}_k) \prod_{i=1}^{N} \prod_{k=1}^{K} \left(\pi_k \mathcal{N}(y_i|\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i, \beta^{-1}) \right)^{z_{ik}} \tag{12}$$

Вариационный ЕМ–алгоритм $q(\mathbf{Z}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}) = q(\mathbf{Z})\, q(\mathbf{W})\, q(\boldsymbol{\pi})$:

1. Е–шаг:

$$\begin{aligned} \log q(\mathbf{Z}^s) &\propto \mathsf{E}_{q/\mathbf{Z}} \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}^{s-1}, \beta^{s-1}, \boldsymbol{\mu}) \\ \log q(\mathbf{W}^s) &\propto \mathsf{E}_{q/\mathbf{W}} \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}^{s-1}, \beta^{s-1}, \boldsymbol{\mu}) \\ \log q(\boldsymbol{\pi}^s) &\propto \mathsf{E}_{q/\boldsymbol{\pi}} \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}^{s-1}, \beta^{s-1}, \boldsymbol{\mu}) \end{aligned} \tag{13}$$

2. М–шаг:

$$\mathbf{A}^s, \beta^s = \arg\max_{\mathbf{A}, \beta} \mathbf{E}_{q^s} \log p(\mathbf{y}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \beta, \boldsymbol{\mu}) \tag{14}$$

Итерационные формулы EM–алгоритма[1]:

1. E–шаг:

$$p(z_{ik}=1)=\frac{\exp\left(\mathsf{E}\log\pi_k-\frac{\beta}{2}\left[y_i^2-2y_i\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}\mathbf{w}_k+\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\left(\mathsf{E}\mathbf{w}_k\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}\right)\mathbf{x}_i\right]\right)}{\sum_k p(z_{ik}=1)},$$

$$q(\boldsymbol{\pi})=\mathrm{Dir}(\boldsymbol{\pi}|\boldsymbol{\mu}+\boldsymbol{\gamma}),\quad q(\mathbf{w}_k)=\mathcal{N}(\mathbf{w}_k|\mathbf{m}_k,\mathbf{B}_k),$$

$$\gamma_k=\sum_{i=1}^N\mathsf{E}z_{ik},\quad \mathbf{m}_k=\beta\mathbf{B}_k\left(\sum_{i=1}^N\mathbf{x}_i y_i\mathsf{E}z_{ik}\right),\quad \mathbf{B}_k=\left(\mathbf{A}_k^{-1}+\beta\sum_{i=1}^N\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}z_{ik}\right)^{-1}. \tag{15}$$

2. M–шаг:

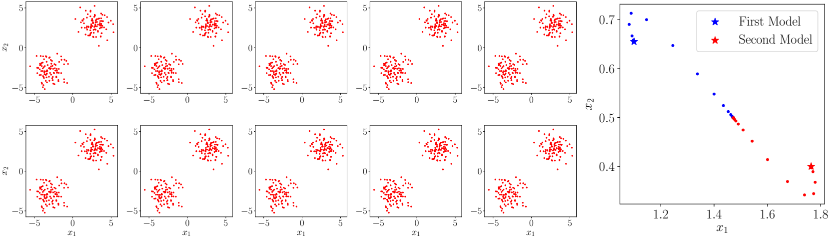
$$\mathbf{A}_k=\mathsf{E}\mathbf{w}_k\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}$$
$$\frac{1}{\beta}=\frac{\sum\sum\left[y_i^2-2y_i\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}\mathbf{w}_k+\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}\mathbf{w}_k\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i\right]\mathsf{E}z_{ik}}{\sum\sum\mathsf{E}z_{ik}} \tag{16}$$

Некоторые математические ожидания:

1. $\mathsf{E}z_{ik}=p(z_{ik}=1)$,
2. $\mathsf{E}\log\pi_k=\psi^0(\mu_k+\gamma_k)-\psi^0(K\mu_k+N)$,
3. $\mathsf{E}\mathbf{w}_k\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}=\mathbf{B}_k+\mathbf{m}_k\mathbf{m}_k^{\mathsf{T}}$.

[1] `https://github.com/andriygav/EMprior/blob/master/paper/Grabovoy2019Draft.pdf`

Пример 1



(a) (b)

На рис. 1a показано, что в случае смеси моделей, предсказать то, какую модель использовать в каждой точке нельзя.
На рис. 1b показана зависимость векторов $\mathbf{w}_k$ — параметры локальных моделей в процессе обучения.

[1] https://github.com/andriygav/MixtureLib

Definition

Смесь экспертов — мультимодель, определяющая правдоподобие веса π_k каждой локальной модели $\mathbf{f}_k$ на признаковом описании объекта $\mathbf{x}$.

$$\hat{\mathbf{f}} = \sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathbf{f}_k, \qquad \pi_k\left(\mathbf{x}, \mathbf{V}\right) : \mathbb{R}^{n \times |\mathbf{V}|} \to [0, 1], \qquad \sum_{k=1}^{K} \pi_k\left(\mathbf{x}, \mathbf{V}\right) = 1 \tag{17}$$

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.

Пример 2:

1. Правдоподобие k-й локальной модели $p_k\left(y_i|\mathbf{w}_k, \mathbf{x}_i\right) = \mathcal{N}\left(y_i|\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i, \beta^{-1}\right)$,
2. Априорное распределение параметров k-й локальной модели $p^k\left(\mathbf{w}_k\right) = \mathcal{N}\left(\mathbf{w}_k|\mathbf{w}_k^0, \mathbf{A}_k\right)$,
3. Шлюзовая функция $\boldsymbol{\pi}\left(\mathbf{x}, \mathbf{V}\right) = \text{softmax}\big(\mathbf{V}_1^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{V}_2^{\mathsf{T}}\mathbf{x}\right)\big)$.

Правдоподобие модели:

$$p\left(\mathbf{y}, \mathbf{W}|\mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \mathbf{W}^0, \beta\right) = \prod_{k=1}^{K}\mathcal{N}\left(\mathbf{w}_k|\mathbf{w}_k^0, \mathbf{A}_k\right)\prod_{i=1}^{N}\left(\sum_{k=1}^{K}\pi_k\mathcal{N}\left(y_i|\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i, \beta^{-1}\right)\right). \quad (18)$$

Введем скрытые переменные $\mathbf{Z} = ||z_{ik}||$, где $z_{ik} = 1 \Leftrightarrow k_i = k$:

$$p\left(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \mathbf{W}|\mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \mathbf{W}^0, \beta\right) = \prod_{k=1}^{K}\mathcal{N}\left(\mathbf{w}_k|\mathbf{w}_k^0, \mathbf{A}_k\right)\prod_{i=1}^{N}\prod_{k=1}^{K}\left(\pi_k\mathcal{N}\left(y_i|\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i, \beta^{-1}\right)\right)^{z_{ik}}. \quad (19)$$

Вариационный ЕМ–алгоритм $q\left(\mathbf{Z}, \mathbf{W}\right) = q\left(\mathbf{Z}\right)q\left(\mathbf{W}\right)$:

1. Е–шаг:

$$\begin{aligned}\log q\left(\mathbf{Z}^s\right) &\propto \mathsf{E}_{q/\mathbf{Z}}\log p\left(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \mathbf{W}|\mathbf{X}, \mathbf{V}^{s-1}, \mathbf{A}^{s-1}, \mathbf{W}^{0,s-1}, \beta^{s-1}\right)\\ \log q\left(\mathbf{W}^s\right) &\propto \mathsf{E}_{q/\mathbf{W}}\log p\left(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \mathbf{W}|\mathbf{X}, \mathbf{V}^{s-1}, \mathbf{A}^{s-1}, \mathbf{W}^{0,s-1}, \beta^{s-1}\right)\end{aligned} \quad (20)$$

2. М–шаг:

$$\mathbf{W}^{0,s}, \mathbf{A}^s, \beta^s = \arg\max_{\mathbf{W}^0, \mathbf{A}, \beta}\mathbf{E}_{q^s}\log p\left(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \mathbf{W}|\mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \mathbf{W}^0, \beta\right) \quad (21)$$

Итерационные формулы EM–алгоритма[1]:

1. E–шаг:

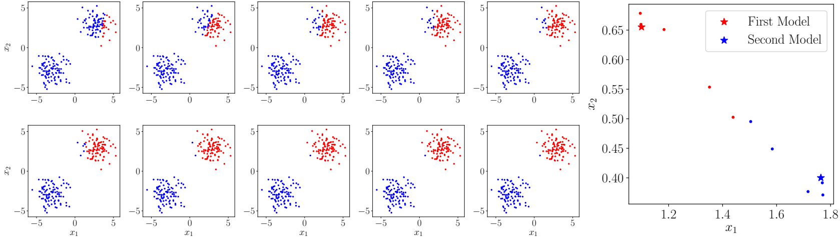
$$p\left(z_{ik}=1\right)=\frac{\exp\left(\log\pi_k\left(\mathbf{x}_i,\mathbf{V}\right)-\frac{\beta}{2}\left(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}\mathbf{w}_k\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}\mathbf{w}_k\right)\right)}{\sum_{k'=1}^{K}\exp\left(\log\pi_{k'}\left(\mathbf{x}_i,\mathbf{V}\right)-\frac{\beta}{2}\left(\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}\mathbf{w}_{k'}\mathbf{w}_{k'}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}\mathbf{w}_{k'}\right)\right)},$$
$$q(\mathbf{w}_k)=\mathcal{N}(\mathbf{w}_k|\mathbf{m}_k,\mathbf{B}_k),$$
$$\mathbf{m}_k=\mathbf{B}_k\left(\mathbf{A}_k^{-1}\mathbf{w}_k^0+\beta\sum_{i=1}^{N}\mathbf{x}_iy_i\mathsf{E}z_{ik}\right),\quad \mathbf{B}_k=\left(\mathbf{A}_k^{-1}+\beta\sum_{i=1}^{N}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}z_{ik}\right)^{-1}. \tag{22}$$

2. M–шаг:

$$\mathbf{A}_k=\mathsf{E}\mathbf{w}_k\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}-\mathbf{w}_k^0\mathsf{E}\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}-\mathsf{E}\mathbf{w}_k\mathbf{w}_k^{0\mathsf{T}}+\mathbf{w}_k^0\mathbf{w}_k^{0\mathsf{T}},$$
$$\frac{1}{\beta}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{K}\left[y_i^2-2y_i\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}\mathbf{w}_k+\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}\mathbf{w}_k\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i\right]\mathsf{E}z_{ik}, \tag{23}$$
$$\mathbf{w}_k^0=\mathsf{E}\mathbf{w}_k,$$
$$\mathbf{V}=\arg\max_{\mathbf{V}}\mathbf{E}_{q^s}\log p\big(\mathbf{y},\mathbf{Z},\mathbf{W}|\mathbf{X},\mathbf{V},\mathbf{A},\mathbf{W}^0,\beta\big).$$

[1] https://github.com/andriygav/EMprior/blob/master/paper/Grabovoy2019MixtureOfExpert.pdf

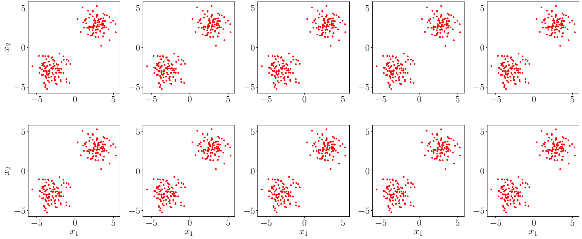
Пример 2



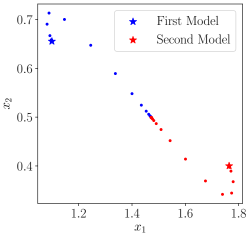
(c) (d)

На рис. 1c показано, что в случае смеси экспертов гипермодель предсказывает к какому классу относится каждая точка в пространстве объектов.
На рис. 1d показана зависимость векторов $\mathbf{w}_k$ — параметры локальных моделей в процессе обучения.

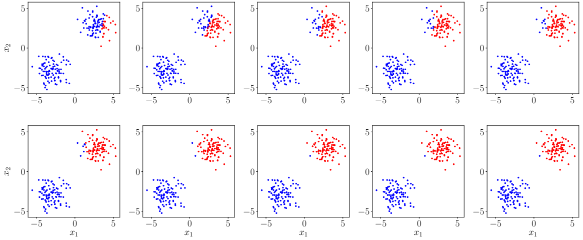
[1] `https://github.com/andriygav/MixtureLib`



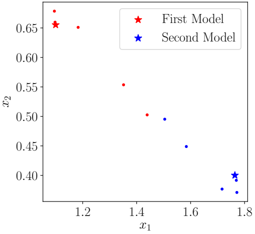
(e) Смесь Моделей



(f) Смесь Моделей



(g) Смесь Экспертов



(h) Смесь Экспертов

[1] https://github.com/andriygav/MixtureLib

Цель: предложить метод построения ансамбля локально аппроксимирующих моделей для поиска окружностей на изображении.

Задачи

1. Предложить метод поиска окружности при помощи линейной модели, для поиска нескольких окружностей предложить метод построения смеси локальных аппроксимирующих моделей.
2. Предложить априорные распределения на параметры локальных моделей.

Исследуемая проблема

1. Снижение размерности пространства описаний изображения.

Метод решения

В качестве мультимодели предлагается использовать смесь экспертов. Для повышения качества мультимодели предлагается ввести априорные распределения параметров локальных моделей. Вводится *регуляризация* априорных распределений для учета взаимосвязи между априорными распределениями разных локальных моделей смеси.

1. *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.
2. *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.
3. *Bishop C.* Pattern Recognition and Machine Learning. — Berlin: Springer, 2006. 758 p.
4. *I. Matveev* Detection of iris in image by interrelated maxima of brightness gradient projections // Appl.Comput. Math. 9 (2), 252–257, 2010.
5. *K. Bowyer, K. Hollingsworth, P. Flynn* A Survey of Iris Biometrics Research: 2008–2010.

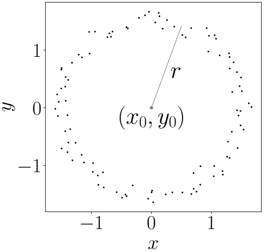
Задано бинарное изображение:

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

где 1 — черная точка, 0 — белая точка фона.
По изображению $\mathbf{M}$ строится выборка $\mathbf{C}$:

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

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



Пусть x_0, y_0 — центр окружности, которую требуется найти, а r ее радиус.
Точки $(x_i, y_i) \in \mathbf{C}$ должны удовлетворять уравнению окружности:

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

Задачу линейной регрессии для нахождения окружности:

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

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

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

Универсальная модель–ансамбль: смесь экспертов

Задана выборка:

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

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

Definition

Смесь экспертов — мультимодель, определяющая правдоподобие веса π_k каждой локальной модели $\mathbf{f}_k$ на признаковом описании объекта $\mathbf{x}$.

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

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

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

$$\mathbf{f}_k(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_k^{\mathsf{T}} \mathbf{x}, \quad \boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}, \mathbf{V}) = \mathrm{softmax}\bigl(\mathbf{V}_1^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\sigma}\bigl(\mathbf{V}_2^{\mathsf{T}} \mathbf{x}\bigr)\bigr),$$

где $\mathbf{V} = \bigl\{\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2\bigr\}$ — параметры шлюзовой функции.

Параметры локальных моделей оптимизируются согласно принципу максимального правдоподобия модели:

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

где $\mathbf{W} = [\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \cdots, \mathbf{w}_K]^\mathsf{T}$.
Задача оптимизации параметров локальных моделей и параметров смеси:

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

Рассматривается вероятностная постановка задачи:

1) правдоподобие выборки $p_k(y_i|\mathbf{w}_k, \mathbf{x}_i) = \mathcal{N}(y_i|\mathbf{w}_k^\mathsf{T}\mathbf{x}_i, \beta^{-1})$, где β уровень шума,
2) априорное распределение параметров $p^k(\mathbf{w}_k) = \mathcal{N}(\mathbf{w}_k|\mathbf{w}_k^0, \mathbf{A}_k)$, где $\mathbf{w}_k^0$ — вектор размера $n \times 1$, $\mathbf{A}_k$ — ковариационная матрица параметров,
3) регуляризация априорного распределения $p(\boldsymbol{\varepsilon}_{k,k'}|\boldsymbol{\alpha}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{\varepsilon}_{k,k'}|\mathbf{0}, \boldsymbol{\Xi})$, где $\boldsymbol{\Xi}$ — ковариационная матрица общего вида, $\boldsymbol{\varepsilon}_{k,k'} = \mathbf{w}_k^0 - \mathbf{w}_{k'}^0$.

Правдоподобие модели включает правдоподобие выборки, априорное распределение параметров, а также их регуляризацию

$$p\big(\mathbf{y}, \mathbf{W}|\mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \mathbf{W}^0, \boldsymbol{\Xi}, \beta\big) = \prod_{k,k'=1}^{K} \mathcal{N}\left(\boldsymbol{\varepsilon}_{k,k'}|\mathbf{0}, \boldsymbol{\Xi}\right) \cdot$$
$$\cdot \prod_{k=1}^{K} \mathcal{N}\left(\mathbf{w}_k|\mathbf{w}_k^0, \mathbf{A}_k\right) \prod_{i=1}^{N} \left(\sum_{k=1}^{K} \pi_k \mathcal{N}\left(y_i|\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i, \beta^{-1}\right)\right),$$

где $\mathbf{A} = \big\{\mathbf{A}_1, \cdots, \mathbf{A}_K\big\}$. Введем скрытые переменные $\mathbf{Z} = [z_{ik}]$, где $z_{ik} = 1$ тогда и только тогда, когда $k_i = k$:

$$\log p\big(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \mathbf{W}|\mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \mathbf{W}^0, \boldsymbol{\Xi}, \beta\big) =$$
$$= \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} z_{ik}\left[\log \pi_k\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{V}\right) - \frac{\beta}{2}\left(y_i - \mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i\right)^2 + \frac{1}{2}\log\frac{\beta}{2\pi}\right] +$$
$$+ \sum_{k=1}^{K}\left[-\frac{1}{2}\left(\mathbf{w}_k - \mathbf{w}_k^0\right)^{\mathsf{T}}\mathbf{A}_k^{-1}\left(\mathbf{w}_k - \mathbf{w}_k^0\right) + \frac{1}{2}\log\det\mathbf{A}_k^{-1} - \frac{n}{2}\log 2\pi\right] +$$
$$+ \sum_{k=1}^{K}\sum_{k'=1}^{K}\left[-\frac{1}{2}\left(\mathbf{w}_k^0 - \mathbf{w}_{k'}^0\right)^{\mathsf{T}}\hat{\boldsymbol{\alpha}}^{-1}\left(\mathbf{w}_k^0 - \mathbf{w}_{k'}^0\right) + \frac{1}{2}\log\det\boldsymbol{\Xi} - \frac{n}{2}\log 2\pi\right].$$

Задача оптимизации параметров локальных моделей и параметров смеси принимает следующий вид:

$$\mathbf{W}, \mathbf{Z}, \mathbf{V}, \mathbf{W}^0, \mathbf{A}, \beta = \arg\max_{\mathbf{W}, \mathbf{Z}, \mathbf{V}, \mathbf{W}^0, \mathbf{A}, \beta} \log p\bigl(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \mathbf{W} | \mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \mathbf{W}^0, \boldsymbol{\Xi}, \beta\bigr).$$

Для оптимизации используется вариационный ЕМ–алгоритм с аппроксимацией среднего поля $q(\mathbf{Z}, \mathbf{W}) = q(\mathbf{Z})\, q(\mathbf{W})$.
Е и М шаги алгоритма имеют следующий вид:

1. Е–шаг:

$$\log q(\mathbf{Z}^s) \propto \mathsf{E}_{q/\mathbf{Z}} \log p\bigl(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \mathbf{W} | \mathbf{X}, \mathbf{V}^{s-1}, \mathbf{A}^{s-1}, \mathbf{W}^{0,s-1}, \boldsymbol{\Xi}, \beta^{s-1}\bigr),$$
$$\log q(\mathbf{W}^s) \propto \mathsf{E}_{q/\mathbf{W}} \log p\bigl(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \mathbf{W} | \mathbf{X}, \mathbf{V}^{s-1}, \mathbf{A}^{s-1}, \mathbf{W}^{0,s-1}, \boldsymbol{\Xi}, \beta^{s-1}\bigr),$$

2. М–шаг:

$$\mathbf{W}^{0,s}, \mathbf{A}^s, \mathbf{V}^s, \beta^s = \arg\max_{\mathbf{W}^0, \mathbf{A}, \mathbf{V}, \beta} \mathsf{E}_{q^s} \log p\bigl(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \mathbf{W} | \mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}, \mathbf{W}^0, \boldsymbol{\Xi}, \beta\bigr),$$

где s — номер итерации.

Итерационные формулы EM–алгоритма:

1. E–шаг:

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

$$q(\mathbf{w}_k)=\mathcal{N}(\mathbf{w}_k|\mathbf{m}_k,\mathbf{B}_k),$$

$$\mathbf{m}_k=\mathbf{B}_k\left(\mathbf{A}_k^{-1}\mathbf{w}_k^0+\beta\sum_{i=1}^{N}\mathbf{x}_iy_i\mathsf{E}z_{ik}\right),\quad \mathbf{B}_k=\left(\mathbf{A}_k^{-1}+\beta\sum_{i=1}^{N}\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}z_{ik}\right)^{-1}.$$

2. M–шаг:

$$\mathbf{A}_k=\mathsf{E}\mathbf{w}_k\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}-\mathbf{w}_k^0\mathsf{E}\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}-\mathsf{E}\mathbf{w}_k\mathbf{w}_k^{0\mathsf{T}}+\mathbf{w}_k^0\mathbf{w}_k^{0\mathsf{T}},$$

$$\frac{1}{\beta}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{K}\left[y_i^2-2y_i\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}\mathbf{w}_k+\mathbf{x}_i^{\mathsf{T}}\mathsf{E}\mathbf{w}_k\mathbf{w}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i\right]\mathsf{E}z_{ik},$$

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

$$\mathbf{V}=\arg\max_{\mathbf{V}}\mathsf{E}_{q^s}\log p\big(\mathbf{y},\mathbf{Z},\mathbf{W}|\mathbf{X},\mathbf{V},\mathbf{A},\mathbf{W}^0,\boldsymbol{\Xi},\beta\big).$$

Вычислительный эксперимент делится на следующие этапы:

1. Анализ синтетических данных с разным типом шума в изображении;
2. Анализ изменения параметров локальных моделей во время обучения;
3. Анализ мультимоделей в зависимости от уровня шума в изображении;
4. Анализ качества модели на реальных данные.

Гиперпараметры заданы следующим образом:

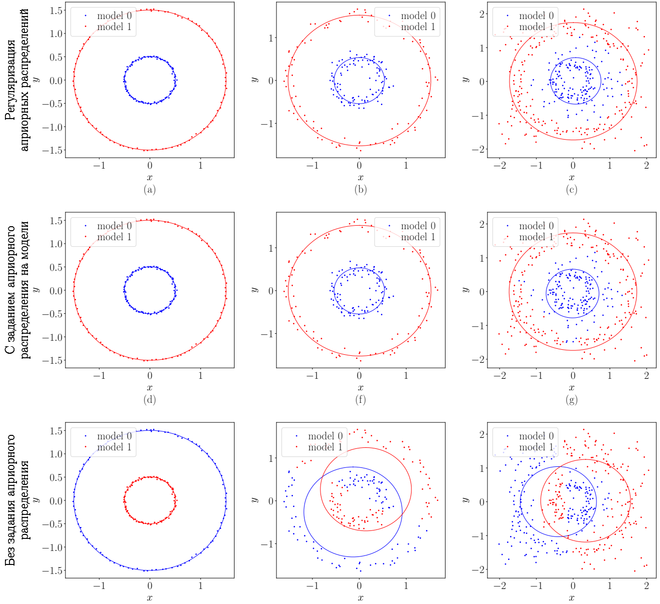
1. Априорные распределения на параметры локальных моделей в эксперименте задано следующим образом:

$$p^1\left(\mathbf{w}_1\right) \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{w}_1^0, \mathbf{I}\right), \quad p^2\left(\mathbf{w}_2\right) \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{w}_2^0, \mathbf{I}\right),$$

   где $\mathbf{w}_1^0 = [0, 0, 0.1]$, $\mathbf{w}_2^0 = [0, 0, 2]$.
2. Параметр регуляризации:

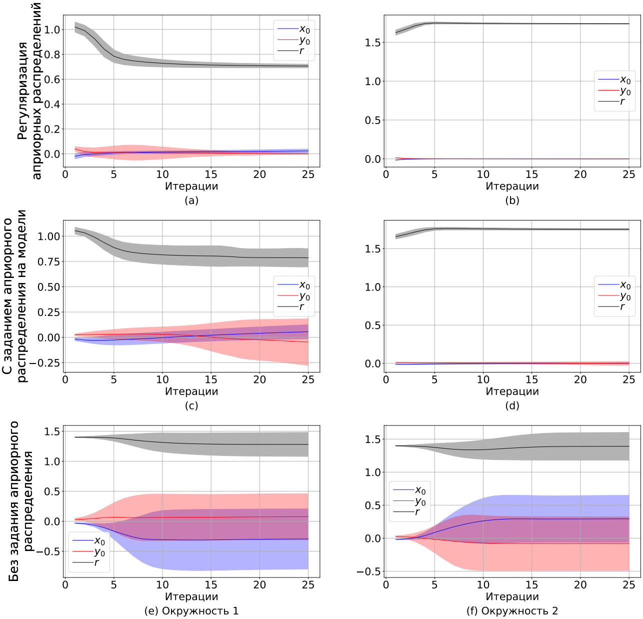
$$\mathbf{\Xi} = \begin{bmatrix} 0.01 & 0 & 0 \\ 0 & 0.01 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

   что указывает на концентричность окружностей.

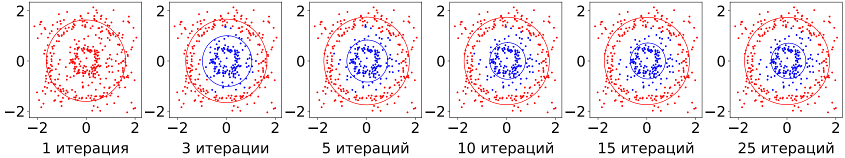


(e) Без шума (h) Шум вблизи окружности (j) Равномерный шум

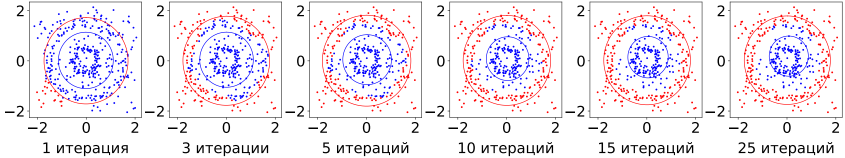
Параметры локальных моделей в процессе обучения



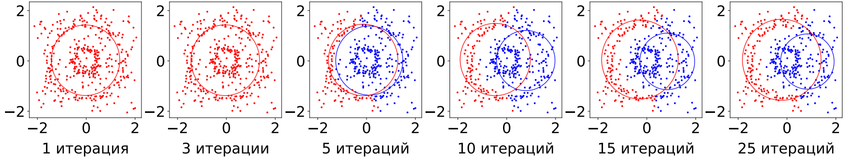
Регуляризация априорных распределений

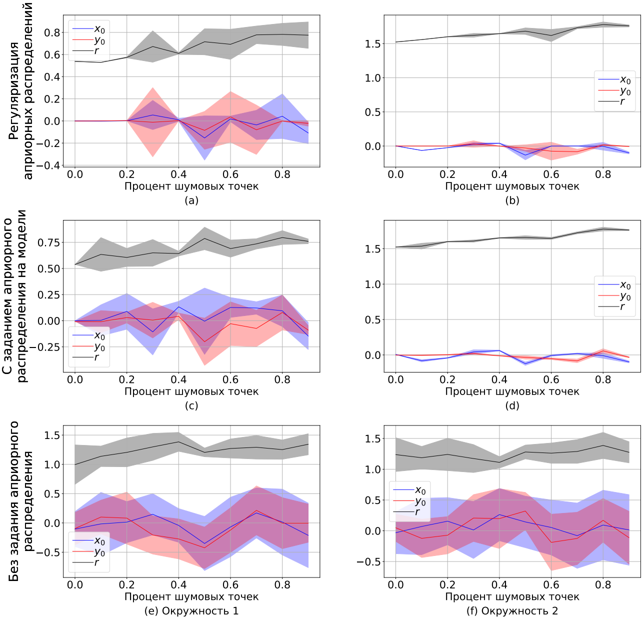


С заданием априорного распределения на модели

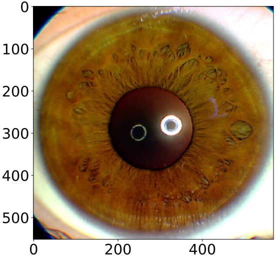


Без задания априорного распределения

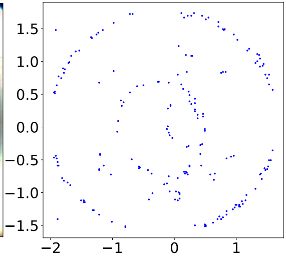




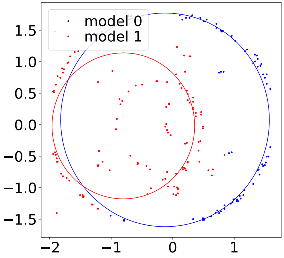
(a) (b) (c) (d) (e) Окружность 1 (f) Окружность 2



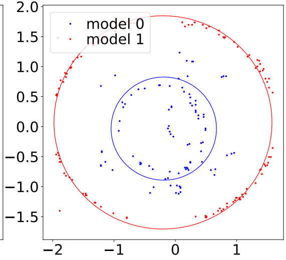
(a) Исходное изображение



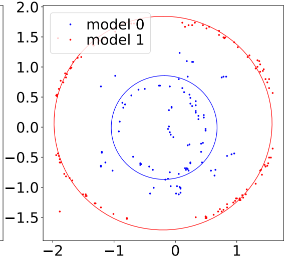
(b) Бинаризованное изображение



(c) Без задания априорного распределения

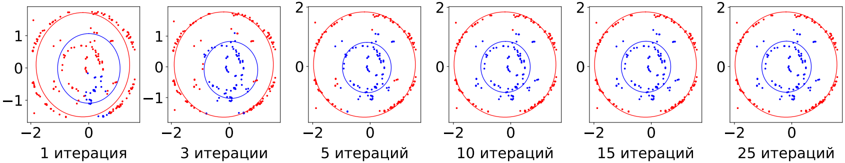


(d) С заданием априорного распределения на модели

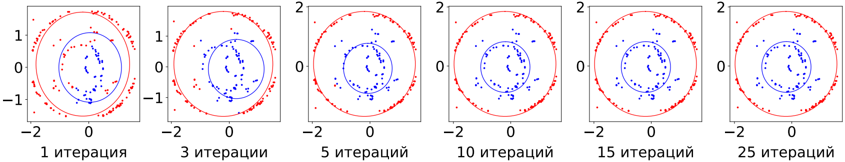


(e) Регуляризация априорных распределений

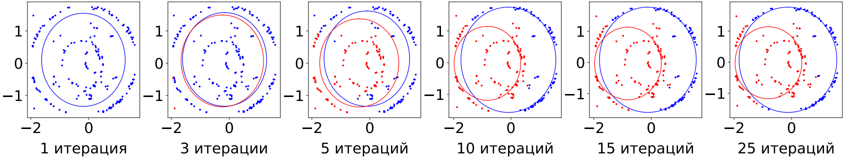
Регуляризация априорных распределений



С заданием априорного распределения на модели



Без задания априорного распределения



Вывод

Сделано:

1. Предложен метод поиска окружностей на бинарном изображении с различными априорными предположениями.
2. Введено понятие регуляризации априорных распределений для улучшения качества мультимодели.
3. В эксперименте показано, что задания регуляризации позволяет улучшить качество и устойчивость модели.

Планируется:

1. Улучшить мультимодель при помощи задания априорного распределения на шлюзовую функцию.
2. Рассмотреть в качестве локальных моделей не только модели, которые описывают данные, а также модель, которая отвечает за шум в данных.
3. Расширить класс локальных моделей с окружности до произвольной кривой второго порядка.

Пусть задано множество объектов $\mathbf{\Omega}$, а также подмножество наблюдаемых объектов $\mathbf{\Omega}'$
$$\mathbf{\Omega}' \subset \mathbf{\Omega},$$
где $|\mathbf{\Omega}'| = N$. Пусть для $\mathbf{\Omega}$ задана некоторая экспертная информация $\boldsymbol{E}(\mathbf{\Omega})$. На основе экспертной информации $\boldsymbol{E}(\mathbf{\Omega})$ введем отображения из множества объектов $\mathbf{\Omega}$:
$$K_y^{\boldsymbol{E}(\mathbf{\Omega})} : \mathbf{\Omega} \to \mathbb{R}, \quad K_x^{\boldsymbol{E}(\mathbf{\Omega})} : \mathbf{\Omega} \to \mathbb{R}^n,$$
где n количество признаков, причем предполагаем, что $n \ll N$. Применив отображения $K_x^{\boldsymbol{E}(\mathbf{\Omega})}$ и $K_y^{\boldsymbol{E}(\mathbf{\Omega})}$ для множества наблюдаемых объектов $\mathbf{\Omega}'$ получаем выборку:
$$\mathfrak{D}\left(\mathbf{\Omega}', \boldsymbol{E}(\mathbf{\Omega})\right) = \{(\mathbf{x}, y) \,|\mathbf{x} = K_x^{\boldsymbol{E}(\mathbf{\Omega})}(\omega),\ y = K_y^{\boldsymbol{E}(\mathbf{\Omega})}(\omega),\ \forall \omega \in \mathbf{\Omega}'\}.$$
Предполагается, что существуют нетривиальные отображения $K_y^{\boldsymbol{E}(\mathbf{\Omega})}, K_x^{\boldsymbol{E}(\mathbf{\Omega})}$, и $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$, такие, что:
$$y \approx \mathbf{x}^{\mathsf{T}}\mathbf{w}, \quad \forall (\mathbf{x}, y) \in \mathfrak{D}\left(\mathbf{\Omega}', \boldsymbol{E}(\mathbf{\Omega})\right),$$
то есть получаем выборку, которая является задачей линейной регрессии по нахождению неизвестного вектора $\mathbf{w}$ (аналогично можно ввести задачу для логистической регрессии).

В случае, когда экспертная информация представляется в виде объединения нескольких экспертов:

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{\Omega}) = \boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{\Omega}) \cup \boldsymbol{E}_1(\boldsymbol{\Omega}_1) \cup \boldsymbol{E}_2(\boldsymbol{\Omega}_2) \cup \cdots \cup \boldsymbol{E}_K(\boldsymbol{\Omega}_K), \quad \cup_{i=k}^{K} \boldsymbol{\Omega}_k = \boldsymbol{\Omega}$$

в этом случае будем говорить о задаче смеси K экспертов. Каждая информация $\boldsymbol{E}_k(\boldsymbol{\Omega}_k)$ описывает локальную информацию о каком-то подмножестве объектов $\boldsymbol{\Omega}_k$ для всех $k = \overline{1...K}$. Информация эксперта $\boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{\Omega})$ описывает глобальную информацию о всем множестве объектов $\boldsymbol{\Omega}$.
В случае задачи смеси K экспертов вводятся отображения:

$$\begin{aligned} K_y^{\boldsymbol{E}_1(\boldsymbol{\Omega}_1)} : \boldsymbol{\Omega} \to \mathbb{R}, \quad K_x^{\boldsymbol{E}_1(\boldsymbol{\Omega}_1)} : \boldsymbol{\Omega} \to \mathbb{R}^{n_1}&, \\ \cdots& \\ K_y^{\boldsymbol{E}_K(\boldsymbol{\Omega}_K)} : \boldsymbol{\Omega} \to \mathbb{R}, \quad K_x^{\boldsymbol{E}_K(\boldsymbol{\Omega}_K)} : \boldsymbol{\Omega} \to \mathbb{R}^{n_K}&, \end{aligned}$$

где получаем множество отображений во множество локальных моделей, в которых учтены информации от каждого эксперта.
Также, как в и задаче одного эксперта вводится предположения, что каждая локальная модель является линейной:

$$\forall k \in \{1, \cdots K\}, \quad y \approx \mathbf{x}^{\mathsf{T}}\mathbf{w}_k, \quad \forall (\mathbf{x}, y) \in \mathfrak{D}\left(\boldsymbol{\Omega}_k', \boldsymbol{E}(\boldsymbol{\Omega}_k)\right).$$

Заметим, что истинного разбиения $\boldsymbol{\Omega}$ на множества $\{\boldsymbol{\Omega}_k\}_{k=1}^K$ нету. Рассмотрим вектор функцию $\boldsymbol{\pi}$:

$$\boldsymbol{\pi} : \boldsymbol{\Omega} \to \mathbb{R}^K, \quad \sum_{k=1}^{K} \pi_k\left(\omega\right) = 1,\ \forall \omega \in \boldsymbol{\Omega},$$

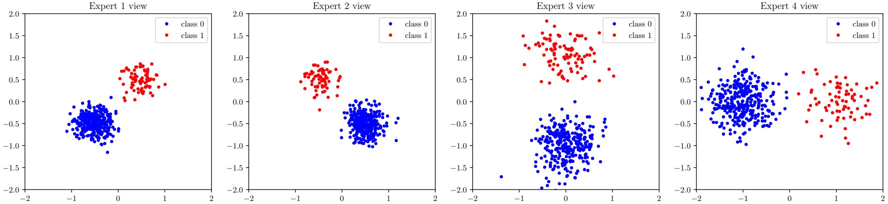
где $\boldsymbol{\pi}$ назовем шлюзовой функцией.

Предположим, что все $\left\{\left(K_x^{\boldsymbol{E}_k(\boldsymbol{\Omega}_k)}, K_y^{\boldsymbol{E}_k(\boldsymbol{\Omega}_k)}\right)\right\}_{k=1}^K$ являются заданными отображениями. Используя локальные модели, построим глобальную мультимодель, которая описывает все множество объектов $\boldsymbol{\Omega}$:

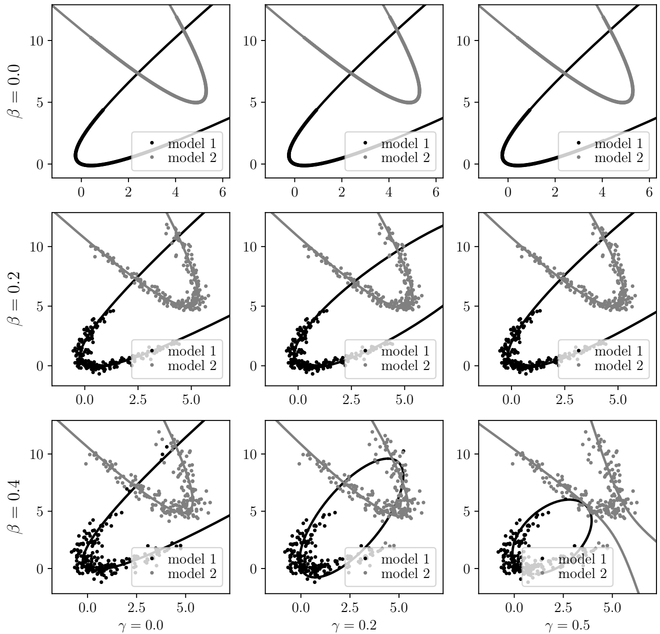
$$\sum_{\omega \in \boldsymbol{\Omega}'} \sum_{k=1}^{K} \pi_k\left(\omega, \mathbf{V}\right) \left(K_y^{\boldsymbol{E}_k(\boldsymbol{\Omega}_k)}\left(\omega\right) - \mathbf{w}_k^{\mathsf{T}} K_x^{\boldsymbol{E}_k(\boldsymbol{\Omega}_k)}\left(\omega\right)\right)^2 + R\left(\mathbf{V}, \mathbf{W}, \boldsymbol{E}\left(\boldsymbol{\Omega}\right)\right) \to \min_{\mathbf{V}, \mathbf{W}}$$

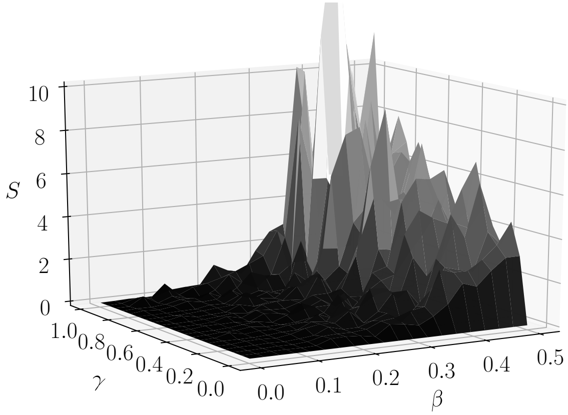
где $\mathbf{W} = [\mathbf{w}_1^{\mathsf{T}}, \cdots, \mathbf{w}_K^{\mathsf{T}}]$, а $R\left(\mathbf{V}, \mathbf{W}, \boldsymbol{E}\left(\boldsymbol{\Omega}\right)\right)$ является некоторой регуляризацией параметров, которая также основывается на экспертной информации, $\mathbf{V}$ — параметры шлюзовой функции.

Пример


Expert 1 view
Expert 2 view
Expert 3 view
Expert 4 view
class 0
class 1

Задача поиска кривых второго порядка: результат аппроксимации




10
8
6
4
2
0
S
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
γ
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
β