Выбор предсказательной модели в режиме многозадачного обучения с применением символьных методов

Набиев Мухаммадшариф Фуркатович

Московский физико-технический институт
Кафедра интеллектуальных систем ФПМИ МФТИ
Научный руководитель: к.ф.-м.н. Бахтеев Олег Юрьевич

2025

Цель исследования

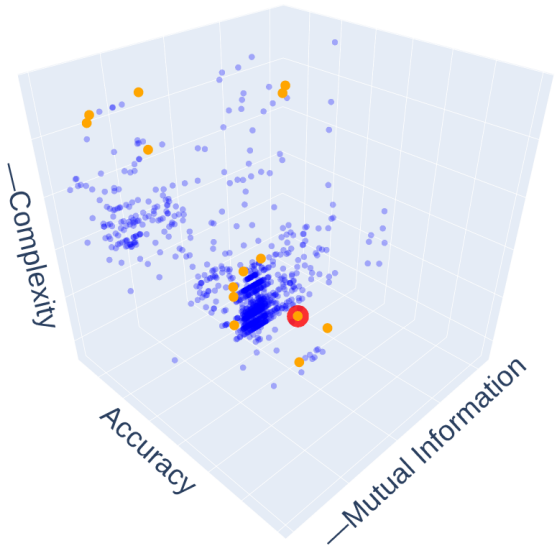
Проблема: Выбор оптимальной предсказательной модели сильно зависит от априорного знания человека о природе данных, т.е. от их индуктивного смещения. Определение индуктивного смещения автоматическим образом является открытой проблемой.

Примером индуктивного смещения могут служить свертки для изображений и временная зависимость для авторегресии.

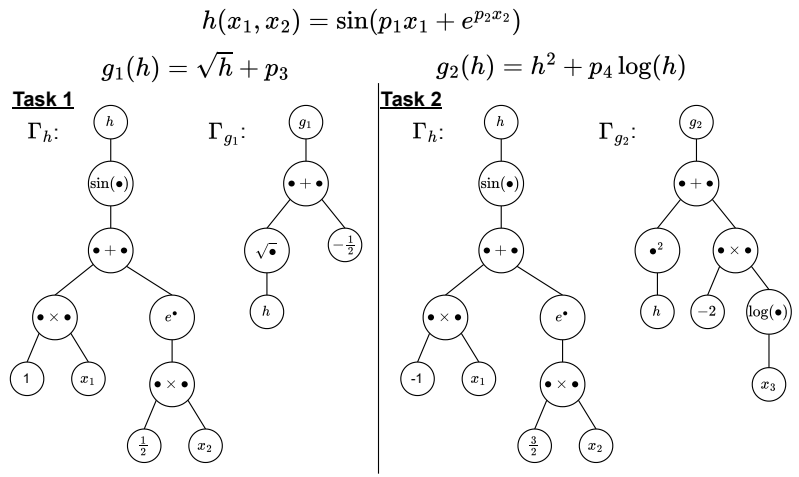
Цель: Предложить метод автоматического определения индуктивного смещения.

Решение: Построение модели в режиме многозадачного обучения с применением символьной регрессии и дальнейшая ее интерпретация.

Архитектура решения



Модели с искомыми критериями.



Структура модели в виде дерева разбора.

Предлагается выбирать модель в режиме многозадачного обучения с учетом информационных критериев.

Гипотеза: модель, отражающая индуктивное смещение, располагается на Парето-фронте по следующим критериям: предсказательная способность, длина описания и взаимная информация между исходным объектом выборки и его представлением.

Caruana. Multitask learning: a knowledge-based source of inductive bias. 1993

Постановка задачи

Пусть $\mathfrak{T} = \{T_i\}_{i=1}^m$ – множество задач. Задаче T_i соответствует набор данных $\mathfrak{D}_i = (\mathbf{X}^i, \mathbf{y}_i)$, где $\mathbf{X}^i \in \mathbb{R}^{N_i \times n}$, а $\mathbf{y}^i \in \mathcal{Y}$. Для регрессии $\mathcal{Y} = \mathbb{R}^{N_i}$ а для классификации $\mathcal{Y} = \{1, \ldots, K\}^{N_i}$.

- Моделью $\mathbf{f}(\mathbf{x}; \mathbf{w})$ назовем отображение $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^l \to \mathcal{Y}^m$, структура $\Gamma_{\mathbf{f}}$ модели которой представима в виде дерева разбора символьного выражения.
- Декомпозируем модель как $\mathbf{f} = \mathbf{g} \circ \mathbf{h} = (g_1 \circ \mathbf{h}, \ldots, g_m \circ \mathbf{h})$. Модели $\mathbf{h}$ и $\mathbf{g}$ мы назовем *энкодером* и *декодером* соответственно.
- Назовем *индуктивным смещением* для декомпозируемой модели структуру первой части $\Gamma_{\mathbf{h}}$ модели $\mathbf{f}$.

Утверждение (Набиев, 2025)

Для любой модели $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \to \mathcal{Y}^m$ *существует такая модель* $\mathbf{h} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^d$ *и* $\mathbf{g} : \mathbb{R}^d \to \mathcal{Y}^m$, *что* $f = g \circ h$.

Постановка задачи

Теорема (Набиев, 2025)

Для скрытого пространства $\mathbb{R}^d$, такого что $d \geq m$, существует разложение $f = g \circ h$, где $g = \mathrm{Id}_Z$, а $Z \cong \mathcal{Y}^m$.

Энкодер $\mathbf{h}$ задает достаточную статистику относительно $\mathbf{y}$, если $\mathsf{I}(\mathbf{h}(\mathbf{X}), \mathbf{y}) = \mathsf{I}(\mathbf{X}, \mathbf{y})$.

Принцип Information Bottleneck (IB) — приближение минимальной достаточной статистики:

$$\min_{p(\mathbf{h}(\mathbf{x})|\mathbf{x})} \mathsf{I}(\mathbf{X}, \mathbf{h}(\mathbf{X})) - \beta\, \mathsf{I}(\mathbf{h}(\mathbf{X}), \mathbf{y}),$$

где параметр β задаёт баланс между сжатием и значимостью.

Для выполнения условия достаточности минимизируем $\mathsf{I}(\mathbf{X}, \mathbf{h}(\mathbf{X}))$:

$$\mathsf{I}(\mathbf{X}, \mathbf{h}(\mathbf{X})) - \beta\, \mathsf{I}(\mathbf{h}(\mathbf{X}), \mathbf{y}) \approx \mathsf{I}(\mathbf{X}, \mathbf{h}(\mathbf{X})) - \beta' \cdot L(f_i(\mathbf{X}), \mathbf{y}),$$

где L — функция потерь.

Tishby, Zaslavsky. Deep learning and the information bottleneck principle. 2015

Постановка задачи

Задача оптимизации принимает вид:

$$\Gamma_{\mathbf{h}} = \underset{\mathbf{f}=(\mathbf{g}_1\circ\mathbf{h},\ldots,\mathbf{g}_m\circ\mathbf{h})}{\arg\min} \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} L_i(f_i(\mathbf{X}^i;\mathbf{w}_i^*),\mathbf{y}^i) + \lambda_1\, \mathsf{I}(\mathbf{X}^i,\mathbf{h}(\mathbf{X}^i)) + \lambda_2 C(\mathbf{f}),$$

$$\text{s.t. } \mathbf{w}_i^* = \arg\min_{\mathbf{w}} L_i(f_i(\mathbf{X}^i;\mathbf{w}),\mathbf{y}^i)$$

где $C : \mathfrak{F} \to \mathbb{R}$ — длина описания модели, с помощью кодирования Хаффмана.

Теорема (Набиев, 2025)

Пусть кол-во задач $m = 1$. Тогда существует решение f, которое можно разложить как $f = g \circ h$, где $g = \mathsf{Id}$, а $h = f$.

Следствие

Пусть имеется $m > 1$ задач, и пусть каждая задача T_i аппроксимируется функцией $f_i(\mathbf{x}) = [\mathbf{f}(\mathbf{x},\mathbf{w}_i)]_i$, где: $\Gamma_{g_i} = \Gamma_{g_j}$ для всех $i,j \in \{1,\ldots,m\}$. Тогда существует декомпозиция вида $\mathbf{h}(\mathbf{x},\mathbf{w}) = \mathbf{f}(\mathbf{x};\mathbf{w}), \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$, такая что для каждой задачи $f_i(\mathbf{x}) = (\mathbf{g}\circ\mathbf{h})(\mathbf{x};\mathbf{w}_i) = \mathbf{h}(\mathbf{x};\mathbf{w}_i)$.

Данные для эксперимента

Эксперимент проводился на четырех типов выборок:

1. **Окружность**: 3 задачи: данные — точки окружности. Задачи имеют вид: $[r > 0], r + 0.5$ и $\sqrt{r} - 0.5$. Оптимальная модель — кривая второго порядка.
2. **Авторегрессия**: Задачи вида: $y_t = \alpha y_{t-1} + \varepsilon$. Модели оценивались по взаимной информации и длине описания.
3. **4-пикселя**: 8 задач: 6 бинарных классификаций и 2 регрессии. Оптимальная модель — использует локальную пространственную информацию.
4. **MNIST**: Сравнивались модели с масками, имитирующими свёртки, и случайными масками.

Гипотеза: структура энкодера будет содержать операции характерные для заданного типа выборки.

Результаты эксперимента: окружность и 4-пикселя

Окружность:

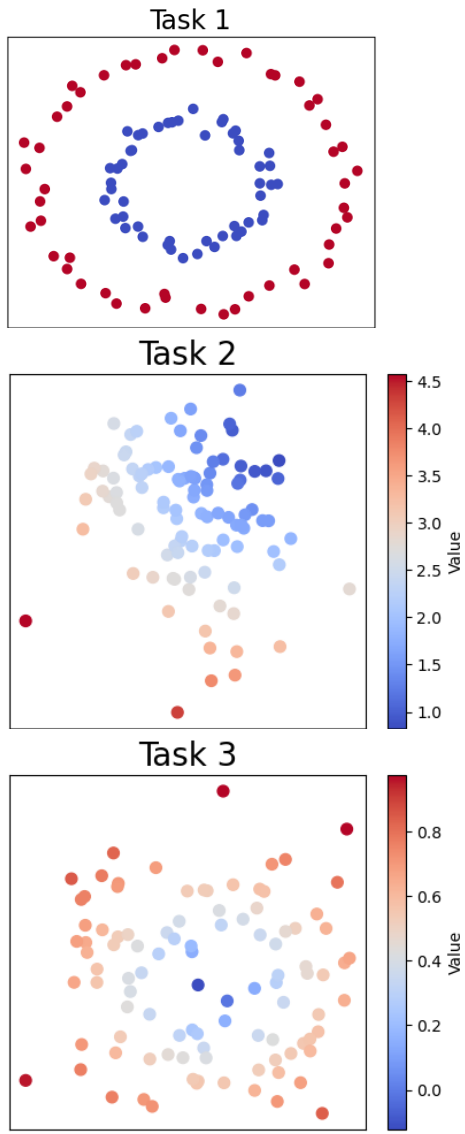
1. $h_0 = p_1$, $h_1 = x_0^2 + x_1^2$
2. $h_0 = (p_2 x_0 + x_1)^2$, $h_1 = p_1$
3. $h_0 = x_0^2 + x_1^2$, $h_1 = p_0$
4. $h_0 = p_2$, $h_1 = (x_1 + p_0 x_0)^2$
5. $h_0 = (x_0 + x_1)^2$, $h_1 = p_2$

Вывод: Модели 1, 3 и 5 демонстрируют высокую точность при минимальной сложности, соответствуя структуре задачи, а 2 и 4 не доминируют.

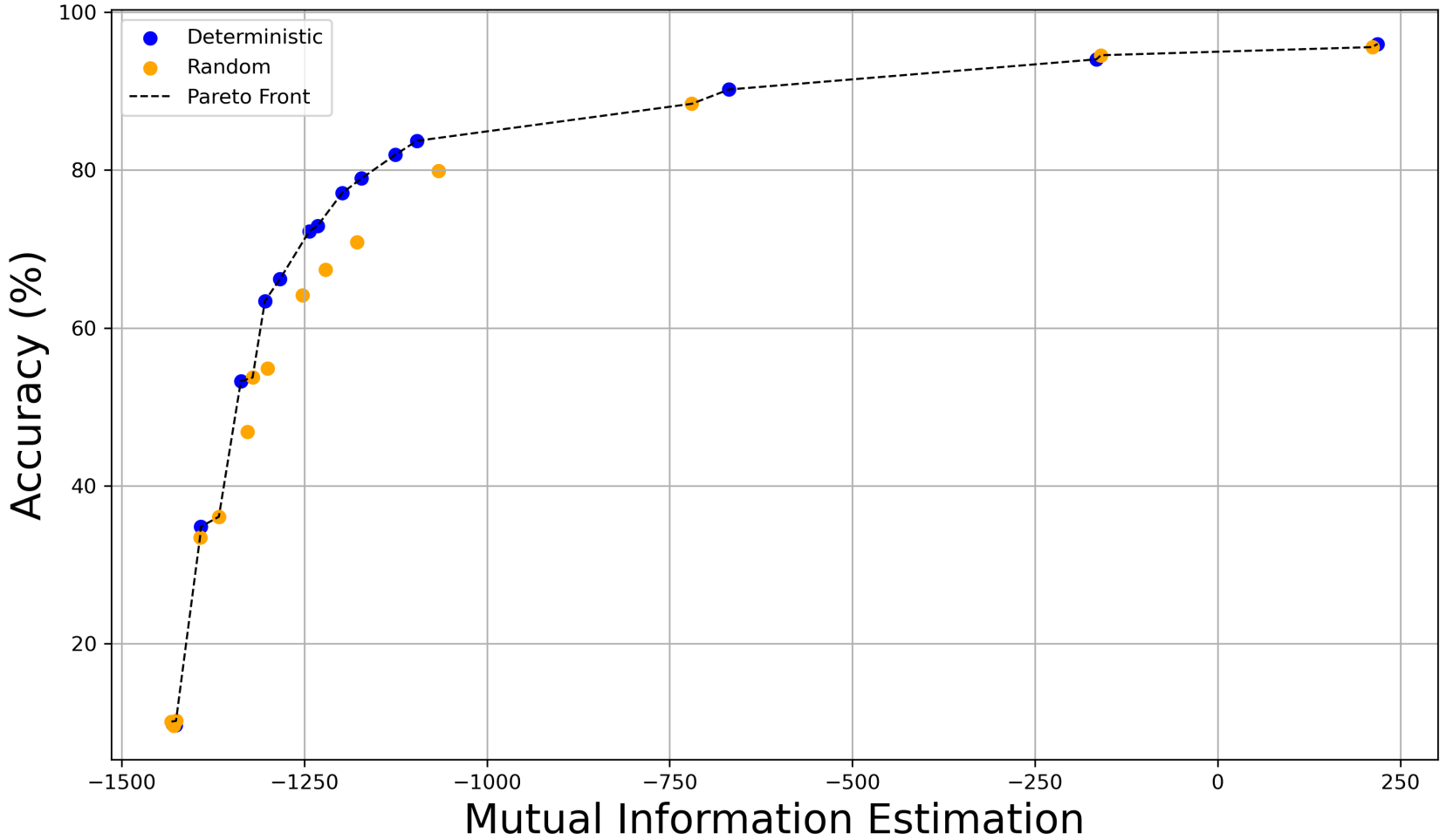
4-пикселя:

1. $h_0 = p_3 x_1 - x_0 - x_2 - p_5$, $h_1 = p_2 x_2 + x_3$
2. $h_0 = x_1$, $h_1 = \max(p_4, x_2 - x_0) + p_5 x_2 - x_3$
3. $h_0 = (x_1 + p_2)(p_3 x_3 + p_1 x_2)$, $h_1 = x_1 + p_1 x_0$
4. $h_0 = p_3 x_1 - x_3(p_0 + x_2)$, $h_1 = x_0 + p_2 x_2$
5. $h_0 = p_3(x_2 - p_4)(p_2 + x_0 + x_1)$, $h_1 = x_1(p_1 - x_3)$

Вывод: Все модели, кроме 2, локальны (учитывает пиксель и соседей в радиусе 2) и хорошо сбалансированы по точности, длине описания и взаимной информации.



Результаты эксперимента: MNIST



Вывод: Модели учитывающие локальность достигают более высокой точности при заданной взаимной информации, т.е. они лежат на Парето-фронте.

Заключение

Выносится на защиту

1. Предложен критерий выбора модели для определения индуктивного смещения для заданого множества задач.
2. Приведены теоретические обоснования для предложенного метода.
3. Проведены эксперименты, которые показали, что модели с оптимальным соотношением качества, информации и сжатия располагаются на Парето-фронте.

- Результаты были доложены на 67-й конференции МФТИ.
- Планируется подача работы в рецензируемый журнал.

Источники

[1] Rich Caruana. Multitask learning: a knowledge-based source of inductive bias. In *Proceedings of the Tenth International Conference on International Conference on Machine Learning*, ICML'93, page 41–48, San Francisco, CA, USA, 1993. Morgan Kaufmann Publishers Inc.

[2] Cranmer et al. Discovering symbolic models from deep learning with inductive biases. In *Proceedings of the 34th International Conference on Neural Information Processing Systems*, NIPS '20, Red Hook, NY, USA, 2020. Curran Associates Inc.

[3] A.S. Kulunchakov and V.V. Strijov. Generation of simple structured information retrieval functions by genetic algorithm without stagnation. *Expert Systems with Applications*, 85:221–230, 2017.

[4] Naftali Tishby and Noga Zaslavsky. Deep learning and the information bottleneck principle. *2015 IEEE Information Theory Workshop (ITW)*, pages 1–5, 2015.

Приложение: таблица для окружности

	#	Accuracy	MSE_1	MSE_2	$I(\mathbf{h}(\mathbf{X}), \mathbf{X})$	C
No reg.	1	1.00	$4.63 \cdot 10^{-2}$	$2.22 \cdot 10^{-2}$	2.98	22
	2	1.00	$6.52 \cdot 10^{-2}$	$3.60 \cdot 10^{-3}$	4.20	34
	3	0.82	$3.56 \cdot 10^{-2}$	$4.68 \cdot 10^{-3}$	4.82	18
	4	1.00	$2.10 \cdot 10^{-2}$	$6.24 \cdot 10^{-3}$	2.98	43
	5	0.57	$2.62 \cdot 10^{-2}$	$3.90 \cdot 10^{-2}$	2.13	38
Reg.	6	0.83	$4.08 \cdot 10^{-14}$	$2.26 \cdot 10^{-15}$	1.85	12
	7	0.80	$6.36 \cdot 10^{-2}$	$2.11 \cdot 10^{-2}$	1.56	16
	8	0.77	$7.14 \cdot 10^{-16}$	$1.14 \cdot 10^{-4}$	1.86	12
	9	0.78	$6.33 \cdot 10^{-2}$	$2.12 \cdot 10^{-2}$	1.56	16
	10	0.80	$6.57 \cdot 10^{-2}$	$2.80 \cdot 10^{-2}$	1.86	10

Найденные модели и метрики для задачи окружности.

Приложение: таблицы для 4-пикселя и авторегрессии

#	Average accuracy	Average MSE	$\mathrm{I}(\mathbf{h}(\mathbf{X}), \mathbf{X})$	C
1	0.98	$3.5 \cdot 10^{-3}$	9.57	36
2	0.92	$8.19 \cdot 10^{-4}$	9.14	30
3	0.97	$5.96 \cdot 10^{-3}$	8.58	43
4	0.94	$1.67 \cdot 10^{-13}$	9.96	36
5	0.94	$3.93 \cdot 10^{-2}$	8.30	45

Найденные модели и метрики для 4-пикслея.

#Datasets	Models	$\mathrm{I}(\mathbf{h}(\mathbf{X}), \mathbf{X})$	C
1, 2, 5	$p_0 x_t$	5.83	5
10	$p_0 sin^2(x_t) x_t$	3.14	18

Найденные модели и метрики для авторегрессии.

Приложение: модели для окружности

Model 1:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= x_0(x_1 + x_1),\\
h_1 &= (x_0 + p_0) + x_1,\\
g_0 &= \left(p_1 + h_1^2\, p_0^2\right) + p_0(p_1 + p_1)(h_0 + h_0),\\
g_1 &= p_1\, h_0 + p_1 + h_1 p_2,\\
g_2 &= p_2 + (p_1 + h_0)(h_0\, p_0).
\end{aligned}
$$

Model 2:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= (x_0 + p_1)p_0,\\
h_1 &= \sqrt{x_1^2} + p_2 p_0,\\
g_0 &= \left(p_0 + h_0^2\right) + \left(p_1^4 + (h_1 + p_0)h_1\right),\\
g_1 &= h_0^2 + h_1,\\
g_2 &= p_2 h_1 + \sqrt{(h_0 + h_0)^2}.
\end{aligned}
$$

Приложение: модели для окружности

Model 3:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= p_1\big(p_2 + p_0 + x_0\big),\\
h_1 &= x_1,\\
g_0 &= h_1 p_0 + \big(h_1 h_0 + p_2^2\big),\\
g_1 &= h_0^2 + p_0^2 + \big(p_1 p_2 + p_1\big) + p_2 h_1^2,\\
g_2 &= \big(p_2 + h_0^2 + \sqrt{h_1^2}\big) p_2.
\end{aligned}
$$

Model 4:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= p_2 x_0 x_1,\\
h_1 &= x_1 + \big(2p_2 + p_0 + x_0 + p_1\big),\\
g_0 &= \big(h_0 + p_0 + h_0\big) p_0 + h_1^2,\\
g_1 &= (p_1 + h_0)^4 + p_0 p_1 h_1,\\
g_2 &= 2p_1 h_1^2 + h_0 + p_2^2.
\end{aligned}
$$

Приложение: модели для окружности

Model 5:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= x_0 + x_1 x_0 p_1 + x_1 + p_0, \\
h_1 &= p_2^2, \\
g_0 &= h_0\big(h_0 + p_0\big) + \big(h_0 + p_0\big)^2 + 2h_1, \\
g_1 &= h_1 + 4p_0^2 h_0^2\, p_1^2, \\
g_2 &= p_1.
\end{aligned}
$$

Model 6:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= p_1, \\
h_1 &= x_0^2 + x_1^2, \\
g_0 &= \big(h_0 h_1 + 2p_0\big) h_1^2 + h_0, \\
g_1 &= p_0 + \sqrt{h_1} + p_1 p_2 p_0 + p_0^2 p_1 + p_1, \\
g_2 &= p_0 + \sqrt{h_0^2 \sqrt{h_1}}.
\end{aligned}
$$

Приложение: модели для окружности

Model 7:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= \left(p_2 x_0 + x_1\right)^2, \\
h_1 &= p_1, \\
g_0 &= h_0 + h_1 + 4h_0^2(h_0 + p_0)^2, \\
g_1 &= p_2 p_1 + \sqrt{h_0}\, p_1 + p_0, \\
g_2 &= p_0 + h_0(h_1 + p_2 h_0).
\end{aligned}
$$

Model 8:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= x_1^2 + x_0^2, \\
h_1 &= p_0, \\
g_0 &= h_1 h_0 + p_1\left(h_0 + p_1\right) + h_0^2 p_0^2, \\
g_1 &= \sqrt{h_0} + h_1, \\
g_2 &= p_2\left(h_0 p_0 + p_1 + \sqrt{h_0}\right).
\end{aligned}
$$

Приложение: модели для окружности

Model 9:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= p_2, \\
h_1 &= \left(x_1 + x_0 p_0\right)^2, \\
g_0 &= \left(p_2^2 + p_0\right) h_1^2 p_2^2 + 2h_1 + p_2, \\
g_1 &= p_2 + \sqrt{h_1}\left(p_2^2 + p_1 h_1\right), \\
g_2 &= h_0 \sqrt{p_1 + h_1 + h_0^2}.
\end{aligned}
$$

Model 10:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= \left(x_1 + x_0\right)^2, \\
h_1 &= p_2, \\
g_0 &= \left(p_1 + h_0\right)\left(h_1 + p_0 + h_1 h_0\right) + 2p_1, \\
g_1 &= \sqrt{h_0} h_1^2 + h_1 h_0 p_0 + p_1, \\
g_2 &= h_0 p_0 + p_1\left(h_1 + p_2\right)\sqrt{h_0}.
\end{aligned}
$$

Приложение: модели для 4-пикселя

Model 1:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= x_1 p_3 - x_2 - p_5 - x_0, \\
h_1 &= x_2 p_2 + x_3, \\
g_0 &= \big(h_0 + p_1 h_0 - h_1 h_0 - \max(h_1, p_0)\big)\big(\max(h_1 h_0, p_4 + h_1) + h_0 + p_4 p_1\big) \\
g_1 &= h_0\big(p_1(p_4 - h_1) - \max(p_3, h_0)\big).
\end{aligned}
$$

Model 2:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= x_1, \\
h_1 &= \max\big(p_4, x_2 - x_0\big) + x_2 p_5 - x_3, \\
g_0 &= \max\big(h_1, \max(p_5, h_1)\big) - \max\big(p_3, h_1 p_0\big) - h_0 p_2 (h_1 - h_0), \\
g_1 &= \max\big(h_1 - p_5 - p_0, p_1\big) + p_1 + 2 p_3 h_0 (p_3 + h_1)(p_0 + p_5).
\end{aligned}
$$

Приложение: модели для 4-пикселя

Model 3:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= \big(x_1 + p_2\big)\big(p_3 x_3 + p_1 x_2\big),\\
h_1 &= x_1 + p_1 x_0,\\
g_0 &= \max\big(h_1 + p_0 - p_5 h_0, p_5 - p_4\big),\\
g_1 &= -p_4 + p_5 - \max(h_1, h_1) - (h_0 + p_2) + p_0.
\end{aligned}
$$

Model 4:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= x_1 p_3 - x_3\big(p_0 + x_2\big),\\
h_1 &= x_0 + x_2 p_2,\\
g_0 &= h_0(h_0 + h_1) + (h_0 + p_4) - p_1 p_5 \max(h_1, h_1),\\
g_1 &= (p_1 p_2 + p_4 + h_0 + h_1)\max\big(p_1 p_4, \max(h_1 h_0, p_4 h_0)\big).
\end{aligned}
$$

Приложение: модели для 4-пикселя

Model 5:

$$
\begin{aligned}
h_0 &= p_3\big(x_2 - p_4\big)\big(p_2 + x_0 + x_1\big),\\
h_1 &= x_1\big(p_1 - x_3\big),\\
g_0 &= (p_5 - h_0)(p_0 + h_1) - p_4,\\
g_1 &= \max\big(h_0 + h_1, h_0\big) + \max\big(h_1 p_5, p_4\big) - \big(h_1^2 + p_3\big).
\end{aligned}
$$