

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»
Физтех-школа Прикладной Математики и Информатики
Кафедра интеллектуальных систем

Направление подготовки / специальность: 03.04.01 Прикладные математика и физика

Направленность (профиль) подготовки: Математическая физика, компьютерные технологии и математическое моделирование в экономике

ОБУЧЕНИЕ С ЭКСПЕРТОМ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ИНТЕРПРЕТИРУЕМЫХ МОДЕЛЕЙ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

(магистерская диссертация)

Студент:

Грабовой Андрей Валериевич

(подпись студента)

Научный руководитель:

Стрижов Вадим Викторович,
д-р физ.-мат. наук

(подпись научного руководителя)

Консультант (при наличии):

(подпись консультанта)

Москва 2021

Содержание

1	Введение	5
2	Априорные распределения для задачи смеси экспертов	7
2.1	Постановка задачи аппроксимации параметров окружности	8
2.2	Вероятностная постановка задачи смеси экспертов	10
2.3	Вычислительный эксперимент по анализу качества аппроксимации радужки глаза смесью экспертов	13
3	Модели привилегированного обучения и дистилляции	19
3.1	Постановка задачи обучения с учителем: Хинтона и Вапника	22
3.2	Обобщенная вероятностная постановка задачи дистилляции	24
3.3	Анализ вероятностного подхода к дистилляции моделей линейных моделей	30
4	Байесовская дистилляция моделей глубокого обучения	34
4.1	Постановка задачи дистилляции в терминах байесовского подхода	35
4.2	Построение априорного распределения параметров ученика на основе параметров учителя	37
4.3	Анализ качества байесовской дистилляции полносвязных нейронных сетей	40
5	Введение отношения порядка на множестве параметров аппроксимирующих моделей	45
5.1	Задача упорядочивания параметров аппроксимирующих моделей	45
5.2	Фиксация параметров модели в процессе обучения	47
5.3	Вычислительный эксперимент по упорядочиванию параметров	47
6	Релевантность параметров параметрических моделей	52
6.1	Постановка задачи к назначению релевантности параметрам модели	53
6.2	Анализ разных подходов к определению релевантности	57
7	Оптимальный размер выборки для построения линейных моделей	62
7.1	Постановка задачи определения оптимального размера выборки	65
7.2	Обзор методов для определения оптимального размера выборки на основе статистических тестов	65
7.3	Эвристические методы определения достаточного размера выборки	68
7.4	Байесовский подход к определению оптимального размера выборки	69
7.5	Вычислительный эксперимент по анализу разных подходов к определению оптимального размера выборки	70

8	Аппроксимация кривых второго порядка при помощи обучения с экспертом	74
8.1	Постановка задачи поиска параметров кривых второго порядка	77
8.2	Композиция кривых второго порядка на изображении	79
8.3	Анализ смеси экспертов для аппроксимации кривых второго порядка на изображении	80
9	Локальные модели в задачах кластеризации временных рядов	86
9.1	Постановка задачи кластеризации точек временного ряда	88
9.2	Кластеризация точек в фазовом пространстве	89
9.3	Анализ фазовых траекторий в задаче кластеризации точек временного ряда	90
10	Заключение	96
	Список литературы	97

Аннотация

Исследуется проблема понижения сложности аппроксимирующих моделей с целью повышения их интерпретируемости. В рамках данного исследования рассматриваются методы, которые используют экспертную информацию о данных с целью получения простых, более интерпретируемых моделей. Предлагаются методы, основанные на дистилляции моделей глубокого обучения, где модель учителя рассматривается в качестве эксперта. Также предлагаются методы основанные на экспертном описании задачи, что позволяет строить специальные признаковые описания объектов. Теоретические результаты анализируются в вычислительном эксперименте на синтетических выборках и реальных данных. В качестве реальных данных рассматриваются популярные выборки, такие как MNIST, FashionMNIST и Twitter Sentiment Analysis.

Ключевые слова: выбор модели; байесовский вывод; дистилляция модели; локальные преобразования; преобразования вероятностных пространств; релевантность параметров.

Список литературы

- [1] *Грабовой А. В., Бахтеев О. Ю., Стрижов В. В.* Определение релевантности параметров нейросети // Информатика и ее применения, 2019. Т. 13. Вып. 2. С. 62–70.
- [2] *Грабовой А. В., Бахтеев О. Ю., Стрижов В. В.* Введение отношения порядка на множестве параметров аппроксимирующих моделей // Информатика и ее применения, 2020. Т. 14. Вып. 2. С. 58–65.
- [3] *A V Grabovoy, V V Strijov* Quasi-Periodic Time Series Clustering for Human Activity Recognition // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2020 Pp. 333–339
- [4] *Грабовой А. В., Стрижов В. В.* Анализ выбора априорного распределения для смеси экспертов // Журнал Вычислительной Математики и Математической Физики, 2021, С. 1149–1161.
- [5] *Huang, Zehao and Wang, Naiyan* Like What You Like: Knowledge Distill via Neuron Selectivity Transfer // arXiv e-prints, 2017.
- [6] *S. Aeberhard* Wine Data Set, 1991.
- [7] *Linting Xue and Noah Constant and Adam Roberts and Mihir Kale and Rami Al-Rfou and Aditya Siddhant and Aditya Barua and Colin Raffel.* mT5: A massively multilingual pre-trained text-to-text transformer // arXiv preprinted, 2021.
- [8] *He K., Zhang X., Ren S., Sun J.* Deep Residual Learning for Image Recognition // Proc. of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Las Vegas, 2016. P. 770–778.
- [9] *Graves A.* Practical Variational Inference for Neural Networks // Advances in Neural Information Processing Systems, 2011. Vol. 24. P. 2348–2356.
- [10] *Vapnik V., Izmailov R.* Learning Using Privileged Information: Similarity Control and Knowledge Transfer // Journal of Machine Learning Research. 2015. No 16. P. 2023–2049.
- [11] *Sutskever I., Vinyals O., Le Q.* Sequence to Sequence Learning with Neural Networks // Advances in Neural Information Processing Systems, 2014. Vol. 2. P. 3104–3112.
- [12] *Li C., Chen C., Carlson D., Carin L.* Preconditioned Stochastic Gradient Langevin Dynamics for Deep Neural Networks // Thirtieth AAAI Conference on Artificial Intelligence. — Phoenix, USA, 2016. P. 1788–1794.

- [13] *Tibshirani R.* Regression shrinkage and selection via the Lasso // Journal of the Royal Statistical Society, 1996. Vol. 58. P. 267–288.
- [14] *Zou H., Hastie T.* Regularization and variable selection via the Elastic Net // Journal of the Royal Statistical Society, 2005. Vol. 67. P. 301–320.
- [15] *Srivastava N., Hinton G., Krizhevsky A., Sutskever I., Salakhutdinov R.* Dropout: A Simple Way to Prevent Neural Networks from Overfitting // Journal of Machine Learning Research, 2014. Vol. 15. P. 1929–1958.
- [16] *Molchanov D., Ashukha A., Vetrov D.* Variational Dropout Sparsifies Deep Neural Networks // 34th International Conference on Machine Learning. — Sydney, Australia, 2017. Vol. 70. P. 2498–2507.
- [17] *LeCun Y., Denker J., Solla S.* Optimal Brain Damage // Advances in Neural Information Processing Systems, 1989. Vol. 2. P. 598–605.
- [18] *Mandt S., Hoffman M., Blei D.* Stochastic Gradient Descent as Approximate Bayesian Inference // Journal Of Machine Learning Research, 2017. Vol. 18. P. 1–35.
- [19] *Harrison D., Rubinfeld D.* Hedonic prices and the demand for clean air // Journal of Environmental Economics and Management, 1991. Vol. 5. P. 81–102.
- [20] *Maclaurin D., Duvenaud D., Adams R.* Gradient-based Hyperparameter Optimization Through Reversible Learning // Proceedings of the 32th International Conference on Machine Learning, 2015. Vol. 37. P. 2113–2122.
- [21] *Luketina J., Berglund M., Raiko T., Greff K.* Scalable Gradient-based Tuning of Continuous Regularization Hyperparameters // Proceedings of the 33th International Conference on Machine Learning, 2016. Vol. 48. P. 2952–2960.
- [22] *Bishop C.* Pattern Recognition and Machine Learning, 2006. Pp. 396.
- [23] *Neychev R., Katrutsa A., Strijov V.* Robust selection of multicollinear features in forecasting // Factory Laboratory, 2016. Vol. 82. P. 68–74.
- [24] *Neal A., Radford M.* Bayesian Learning for Neural Networks, 1995.
- [25] *Louizos C., Ullrich K., Welling M.* Bayesian Compression for Deep Learning, 2017. P. 3288–3298.
- [26] *J. R. Kwapisz, G. M. Weiss, S. A. Moore* Activity Recognition using Cell Phone Accelerometers // Proceedings of the Fourth International Workshop on Knowledge Discovery from Sensor Data, 2010. Vol. 12. P. 74–82.

- [27] *W. Wang, H. Liu, L. Yu, F. Sun* Activity Recognition using Cell Phone Accelerometers // Joint Conference on Neural Networks, 2014. P. 1185–1190.
- [28] *A. D. Ignatov, V. V. Strijov* Human activity recognition using quasiperiodic time series collected from a single tri-axial accelerometer. // *Multimedial Tools and Applications*, 2015.
- [29] *A. Olivares, J. Ramirez, J. M. Gorris, G. Olivares, M. Damas* Detection of (in)activity periods in human body motion using inertial sensors: A comparative study. // *Sensors*, 12(5):5791–5814, 2012.
- [30] *Y. G. Cinar and H. Mirisae* Period-aware content attention RNNs for time series forecasting with missing values // *Neurocomputing*, 2018. Vol. 312. P. 177–186.
- [31] *A. P. Motrenko, V. V. Strijov* Extracting fundamental periods to segment biomedical signals // *Journal of Biomedical and Health Informatics*, 2015, 20(6). P. 1466 - 1476.
- [32] *Y. P. Lukashin* Adaptive methods for short-term forecasting // *Finansy and Statistik*, 2003.
- [33] *И. П. Ивкин, М. П. Кузнецов* Алгоритм классификации временных рядов акселерометра по комбинированному признаковому описанию. // *Машинное обучение и анализ данных*, 2015.
- [34] *V. V. Strijov, A. M. Katrutsa* Stresstes procedures for features selection algorithms. // *Schemometrics and Intelligent Laboratory System*, 2015.
- [35] *I. Borg, P. J. F. Groenen* *Modern Multidimensional Scaling*. — New York: Springer, 2005. 540 p.
- [36] *Д. Л. Данилова, А. А. Жигловский* Главные компоненты временных рядов: метод "Гусеница". — Санкт-Петербургский университет, 1997.
- [37] *Tianqi C., Carlos G.* XGBoost: A Scalable Tree Boosting System // *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. 2016.
- [38] *Xi C., Hemant I.* Random Forests for Genomic Data Analysis // *Genomics*. 2012. Issues. 99. No. 6. P. 323–329.
- [39] *Esen Y. S., Wilson J., Gader P. D.* Twenty Years of Mixture of Experts // *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*. 2012. Issues. 23. No. 8. P. 1177–1193.

- [40] *Rasmussen C. E., Ghahramani Z.* Infinite Mixtures of Gaussian Process Experts // Advances in Neural Information Processing Systems 14. 2002. P. 881–888.
- [41] *Shazeer N., Mirhoseini A., Maziarz K.* Outrageously large neural networks: the sparsely-gated mixture-of-experts layer // International Conference on Learning Representations. 2017.
- [42] *Jordan M. I.* Hierarchical mixtures of experts and the EM algorithm // Neural Comput. 1994. Vol. 6, No. 2. P. 181–214.
- [43] *Jordan M. I., Jacobs R. A.* Hierarchies of adaptive experts // In Advances in Neural Information Processing Systems. 1991. P. 985–992.
- [44] *Lima C., Coelho A., Zuben F. J.* Hybridizing mixtures of experts with support vector machines: Investigation into nonlinear dynamic systems identification // Inf. Sci. 2007. Vol. 177. No. 10. P. 2049–2074.
- [45] *Cao L.* Support vector machines experts for time series forecasting // Neurocomputing. 2003. Vol. 51. P. 321–339.
- [46] *Yumlu M. S., Gurgen F. S., Okay N.* Financial time series prediction using mixture of experts // In Proc. 18th Int. Symp. Comput. Inf. Sci. 2003. P. 553–560.
- [47] *Cheung Y. M., Leung W. M., Xu L.* Application of mixture of experts model to financial time series forecasting // On Proc. Int. Conf. Neural Netw. Signal Process. 1995. P. 1–4.
- [48] *Weigend A. S., Shi S.* Predicting daily probability distributions of S&P500 returns // J. Forecast. 2000. Vol. 19. No. 4. P. 375–392.
- [49] *Ebrahimpour R., Moradian M. R., Esmkhani A., Jafarlou F. M.* Recognition of Persian handwritten digits using characterization loci and mixture of experts // J. Digital Content Technol. Appl. 2009. Vol. 3. No. 3. P. 42–46.
- [50] *Estabrooks A., Japkowicz N.* A mixture-of-experts framework for text classification // In Proc. Workshop Comput. Natural Lang. Learn., Assoc. Comput. Linguist. 2001. P. 1–8.
- [51] *Mossavat S., Amft O., Petkov Vries B., Kleijn W.* A Bayesian hierarchical mixture of experts approach to estimate speech quality // In Proc. 2nd Int. Workshop Qual. Multimedia Exper. 2010. P. 200–205.
- [52] *Peng F., Jacobs R. A., Tanner M. A.* Bayesian inference in mixtures-of-experts and hierarchical mixtures-of-experts models with an application to speech recognition // J. Amer. Stat. Assoc. 1996. Vol. 91. No. 435. P. 953–960.

- [53] *Tuerk A.* The state based mixture of experts HMM with applications to the recognition of spontaneous speech. Ph.D. thesis. Cambridge: Univ. Cambridge, 2001.
- [54] *Sminchisescu C., Kanaujia A., Metaxas D.* Discriminative density propagation for visual tracking // *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* 2007. Vol. 29. No. 11. P. 2030–2044.
- [55] *Bowyer K., Hollingsworth K., Flynn P.* A Survey of Iris Biometrics Research: 2008–2010.
- [56] *Matveev I.* Detection of iris in image by interrelated maxima of brightness gradient projections // *Appl.Comput. Math.* 2010. Vol. 9. No. 2. P. 252–257.
- [57] *Matveev I., Simonenko I.* Detecting precise iris boundaries by circular shortest path method // *Pattern Recognition and Image Analysis.* 2014. Vol. 24. P. 304–309.
- [58] *Dempster A.P., Laird N.M., Rubin D.B.* Maximum Likelihood from Incomplete Data via the EM Algorithm // *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological).* 1977. Vol. 39. No. 1 P. 1–38.
- [59] Akhtar N, Mian A (2018) Threat of Adversarial Attacks on Deep Learning in Computer Vision: A Survey. *IEEE Access* 6:14410–14430
- [60] Han X, Yao M, Debayan D, Hui L, Ji-Liang T, Anil J (2020) Adversarial Attacks and Defenses in Images, Graphs and Text: A Review. *International Journal of Automation and Computing* 17:151–178
- [61] Ribeiro M, Singh S, Guestrin C (2016) Why Should I Trust You?": Explaining the Predictions of Any Classifier. *KDD '16 Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining* 1135–1144
- [62] Salamani D, Gadatsch S, Golling T, Stewart G, Ghosh A, Rousseau D, Hasib A, Schaarschmidt J (2018) Deep Generative Models for Fast Shower Simulation in ATLAS. 2018 IEEE 14th International Conference on e-Science (e-Science) <https://doi.org/10.1109/eScience.2018.00091>
- [63] Demidenko E (2007) Sample size determination for logistic regression revisited. *Statist. Med.* 26:3385–3397.
- [64] Joseph L, Berger R, Be'lisle P (1995) Bayesian and mixed bayesian likelihood criteria for sample size determination. *Statistician* 16:769–781.

- [65] Joseph L, Wolfson D, Berger R (1997) Sample size calculations for binomial proportions via highest posterior density intervals. *Statistical Medicine* 44:143–154.
- [66] Kloek T (1975). Note on a large-sample result in specification analysis. *Econometrica* 43:933–936.
- [67] Lindley D (1997) The choice of sample size. *The Statistician* 46:129–138.
- [68] Motrenko A, Strijov V, Weber G (2014) Sample size determination for logistic regression. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 255:743–752.
- [69] Quinlan J (1992) Learning with continuous classes. *Proc. 5th Australian Joint Conference on AI* 343–348.
- [70] Qumsiyeh M (2013) Using the bootstrap for estimation the sample size in statistical experiments. *Journal of modern applied statistical methods* 8:305–321.
- [71] Rubin D, Stern H (1998) Sample size determination using posterior predictive distributions. *Sankhya: The Indian Journal of Statistics Special Issue on Bayesian Analysis* 60:161–175.
- [72] Self S, Mauritsen R (1988) Power/sample size calculations for generalized linear models. *Biometrics* 44:79–86.
- [73] Self S, Mauritsen R, Ohara J (1992) Power calculations for likelihood ratio tests in generalized linear models. *Biometrics* 48:31–39.
- [74] Shieh G (2000) On power and sample size calculations for likelihood ratio tests in generalized linear models. *Biometrics* 56:1192–1196.
- [75] Shieh G (2005) On power and sample size calculations for Wald tests in generalized linear models. *Journal of Statistical Planning and Inference* 128:43–59.
- [76] Wang F, Gelfand A (2002) A Simulation-based Approach to Bayesian Sample Size Determination for Performance under a Given Model and for Separating Models. *Statistical Science* 17:193–208.
- [77] Devlin J., Chang M., Lee K., Toutanova K. BERT: Pre-training of Deep Bidirectional Transformers for Language Understanding // arXiv preprint arXiv:1810.04805. 2018.
- [78] Бахтеев О. Ю., Стрижов В. В. Выбор моделей глубокого обучения суб-оптимальной сложности // АиТ. 2018. № 8. С. 129–147.

- [79] *Madala H., Ivakhnenko A.* Inductive Learning Algorithms for Complex Systems Modeling. Boca Raton: CRC Press Inc., 1994.
- [80] *Hochreiter S., Schmidhuber J.* Long short-term memory // Neural Computation. 1997. V. 9. No 8. P. 1735–1780.
- [81] *Alex Krizhevsky and Vinod Nair and Geoffrey Hinton* CIFAR-10 (Canadian Institute for Advanced Research) // <http://www.cs.toronto.edu/~kriz/cifar.html>
- [82] *Deng, J., Dong, W., Socher, R., Li, L.-J., Li, K., Fei-Fei, L.* Imagenet: A large-scale hierarchical image database // IEEE conference on computer vision and pattern recognition, 2009. P. 248–255.
- [83] *Kui Ren and Tianhang Zheng and Zhan Qin and Xue Liu* Adversarial Attacks and Defenses in Deep Learning // Engineering, 2020. P. 346–360.
- [84] *Alex Krizhevsky, Ilya Sutskever, Geoffrey Hinton* ImageNet Classification with Deep Convolutional Neural Networks // NIPS, 2012.
- [85] *Karen Simonyan and Andrew Zisserman* Very Deep Convolutional Networks for Large-Scale Image Recognition // NIPS, 2014.
- [86] *Vaswani A., Shazeer N., Parmar N., Uszkoreit J., Jones L., Gomez A., Kaiser L., Polosukhin I.* Attention Is All You Need // In Advances in Neural Information Processing Systems. 2017. V. 5. P. 6000–6010.
- [87] *Tom B. Brown et al* GPT3: Language Models are Few-Shot Learners // arXiv preprinted, 2020.
- [88] *Yang, Ziqing and Cui, Yiming and Chen, Zhipeng and Che, Wanxiang and Liu, Ting and Wang, Shijin and Hu, Guoping* TextBrewer: An Open-Source Knowledge Distillation Toolkit for Natural Language Processing // Proceedings of the 58th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics: System Demonstrations. 2020. P. 9–16.
- [89] *Hinton G., Vinyals O., Dean J.* Distilling the Knowledge in a Neural Network // NIPS Deep Learning and Representation Learning Workshop. 2015.
- [90] *LeCun Y., Cortes C., Burges C.* The MNIST dataset of handwritten digits, 1998. <http://yann.lecun.com/exdb/mnist/index.html>.
- [91] *Lopez-Paz D., Bottou L., Scholkopf B., Vapnik V.* Unifying Distillation and Privileged Information // In International Conference on Learning Representations. Puerto Rico, 2016.

- [92] *Xiao H., Rasul K., Vollgraf R.* Fashion-MNIST: a Novel Image Dataset for Benchmarking Machine Learning Algorithms // arXiv preprint arXiv:1708.07747. 2017.
- [93] *Wilson T., Kozareva Z., Nakov P., Rosenthal S., Stoyanov V., Ritter A.* SemEval-2013 Task 2: Sentiment Analysis in Twitter // Proceedings of the Seventh International Workshop on Semantic Evaluation (SemEval 2013). Atlanta, 2013. P. 312–320.
- [94] *LeCun Y., Boser B., Denker J., Henderson D., Howard R., Hubbard W., Jackel L.* Backpropagation Applied to Handwritten Zip Code Recognition // Neural Computation. 1989. V. 1. No 4. P. 541–551.
- [95] *Kingma D, Ba J.* Adam: A Method for Stochastic Optimization // arXiv preprint arXiv:1412.6980. 2014.