

# Топологический анализ пространства параметров в задачах выбора мультимоделей

Адуенко Александр

Московский физико-технический институт  
Факультет управления и прикладной математики  
Кафедра интеллектуальных систем

Научный руководитель:  
д. ф.-м. н. В. В. Стрижов

24 июня 2015 года

**Цель исследования:** создать метод выбора мультимodelей при построении моделей банковского кредитного скоринга.

**Мотивация:** Логистическая модель является де-факто стандартом в банковском скоринге, мультимodelи являются интерпретируемым обобщением, позволяющим учитывать неоднородности в данных.

**Проблема:** мультимodelь может содержать большое число похожих modelей, что ведет к ее неинтерпретируемости и низкому качеству прогноза. Признаковые пространства modelей могут не совпадать, в частности иметь разную размерность.

**Метод решения задачи:** анализ пространства параметров мультимodelи с помощью введенной функции сравнения modelей.

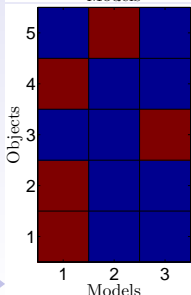
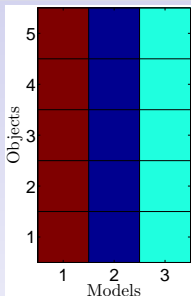
# Мультимодели: Смеси моделей и многоуровневые модели

**Смесь регрессионных моделей** —

регрессионная модель вида

$$f = \sum_{k=1}^K \pi_k f_k(\mathbf{w}_k), \text{ где}$$
$$\sum_{k=1}^K \pi_k = 1, \pi_k \geq 0.$$

**Многоуровневая регрессионная модель** — набор регрессионных моделей  $f_k$ ,  $k = 1, \dots, K$  такой, что при разбиении множества индексов объектов  $\mathcal{I} = \sqcup_{k=1}^K \mathcal{I}_k$  для всех объектов с индексами из  $\mathcal{I}_k$  используется модель  $f_k$ .



Гипотеза порождения данных:

- Сэмплируем веса  $(\pi_1, \dots, \pi_K)$  моделей из некоторого априорного распределения,  $\boldsymbol{\pi} \sim q(\boldsymbol{\pi}|\alpha)$ .
- Сэмплируем параметры каждой из моделей из некоторого априорного распределения  $\mathbf{w}_j \sim p_j(\mathbf{w}_j)$ .
- Для каждого объекта  $\mathbf{x}_i$  выбираем модель  $m_i$ , которой он описывается, причем  $p(m_i = k) = \pi_k$ .
- Для каждого объекта  $\mathbf{x}_i$  определяем значение целевой переменной  $y_i$  в соответствии с моделью  $m_i$ :  
 $y_i \sim \text{Be}(f_{m_i}(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_{m_i}))$ .

Совместное распределение для мультимодели

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi}|\mathbf{X}) = q(\boldsymbol{\pi}|\alpha) \prod_{j=1}^n p_j(\mathbf{w}_j) \prod_{i=1}^m \left( \sum_{k=1}^K \pi_k f_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_k)^{y_i} (1 - f_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_k))^{1-y_i} \right).$$

**Определение 1.** Будем называть мультимодель, заданную совместным распределением  $p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi}|\mathbf{X})$   $(s, \alpha)$ -адекватной, если модели, ее составляющие, являются попарно статистически различимыми с помощью функции близости  $s$  на уровне значимости  $\alpha$ .

Множество всех  $(s, \alpha)$ -адекватных моделей обозначим  $\mathcal{M}_{s, \alpha}$ .

**Определение 2.** Будем называть мультимодель **оптимальной**, если она обладает наибольшей обоснованностью

$$[q(\boldsymbol{\pi}|\alpha), p_1(\mathbf{w}_1), \dots, p_K(\mathbf{w}_K)] = \arg \max_{q, p_1, \dots, p_K} p(\mathbf{y}|\mathbf{X}) =$$

$$\arg \max_{q, p_1, \dots, p_K} \int p(\mathbf{y}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi}|\mathbf{X}) d\mathbf{w}_1 \dots d\mathbf{w}_K d\boldsymbol{\pi}.$$

Оценка максимума апостериорной вероятности для параметров и весов мультимодели

$$[\boldsymbol{\pi}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K] = \arg \max_{\boldsymbol{\pi}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K} p(\boldsymbol{\pi}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K|\mathbf{X}, \mathbf{y}).$$

# EM-алгоритм для смеси логистических моделей

## Совместное распределение для смеси моделей

Введем скрытые переменные  $\{z_{ik}\}$ , такие, что  $\sum_{k=1}^K z_{ik} = 1$  и  $z_{ik} = 1$  означает, что объект  $(\mathbf{x}_i, y_i)$  относится к модели  $k$ .

$$p(\boldsymbol{\pi}|\alpha) = \begin{cases} 0, & \min_k \pi_k = 0, \\ \frac{\Gamma(K\alpha)}{\Gamma^K(\alpha)} \prod_{k=1}^K \pi_k^{\alpha-1}, & \text{иначе.} \end{cases}$$

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{Z}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K | \mathbf{X}, \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_K) = \prod_{k=1}^K p_k(\mathbf{w}_k | \mathbf{0}, \mathbf{A}_k^{-1}) \frac{\Gamma(K\alpha)}{\Gamma^K(\alpha)} \prod_{k=1}^K \pi_k^{\alpha-1} \prod_{i=1}^m \prod_{k=1}^K \{\pi_k f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_k)^{y_i} (1 - f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_k))^{1-y_i}\}^{z_{ik}}.$$

## E-шаг

$$\gamma_{ik} = \mathbb{E} z_{ik} = \frac{\pi_k f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_k)^{y_i} (1 - f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_k))^{1-y_i}}{\sum_{j=1}^K \pi_j f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_j)^{y_i} (1 - f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_j))^{1-y_i}}.$$

$$\begin{aligned} \tilde{l}(\mathbf{y}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K | \mathbf{X}) &= \mathbb{E}_{\mathbf{Z}}[-\log L(\mathbf{y}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{Z}, \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K | \mathbf{X})] = \\ &- \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^K \gamma_{ik} \{ \log \pi_k + y_i \log(f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_k)) + (1 - y_i) \log(1 - f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_k)) \} \\ &+ \sum_{k=1}^K (\alpha - 1) \log \pi_k + \sum_{k=1}^K \log N(\mathbf{w}_k | \mathbf{0}, \mathbf{A}_k^{-1}) + \text{const.} \end{aligned}$$

$$\pi_k = \begin{cases} 0, & \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} + \alpha - 1 < 0, \\ \frac{\sum_{i=1}^m \gamma_{ik} + \alpha - 1}{\sum_{l: \gamma_{il} + \alpha - 1 > 0} (\sum_{i=1}^m \gamma_{il} + \alpha - 1)}, & \text{иначе.} \end{cases}$$

$$\tilde{l}(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_K, \boldsymbol{\pi} | \mathbf{X}, \mathbf{y}) = - \sum_{k=1}^K \{ \log \pi_k \sum_{i=1}^m \gamma_{ik} \} + \sum_{k=1}^K \tilde{l}_k(\mathbf{w}_k | \mathbf{X}, \mathbf{y}).$$

$$\frac{\partial \tilde{l}_k}{\partial \mathbf{w}_k} = \mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Gamma}_k (\mathbf{f} - \mathbf{y}) + \mathbf{A}_k \mathbf{w}_k,$$

$$\mathbf{H}_k = \mathbf{X}^\top \mathbf{R}_k \mathbf{X} + \mathbf{A}_k,$$

$$\mathbf{R}_k = \text{diag}(\gamma_{ik} f(\mathbf{x}_i^\top \mathbf{w}_k) f(-\mathbf{x}_i^\top \mathbf{w}_k)).$$

# Постановка задачи сравнения моделей

- Пусть  $f_1$  и  $f_2$  две модели,  $\mathbf{w}_1$ ,  $\mathbf{w}_2$  – векторы параметров моделей  $f_1$  и  $f_2$ ;
- Выборки  $(\mathbf{X}_1, \mathbf{y}_1)$  и  $(\mathbf{X}_2, \mathbf{y}_2)$ ,  $y_{1,i} = f_1(\mathbf{x}_{1,i}, \mathbf{w}_1)$ ,  $y_{2,i} = f_2(\mathbf{x}_{2,i}, \mathbf{w}_2)$ ;
- Априорные распределения на параметры моделей  $\mathbf{w}_1 \sim p_1(\mathbf{w})$ ,  $\mathbf{w}_2 \sim p_2(\mathbf{w})$ ;
- Апостериорные распределения  $p(\mathbf{w}_1|\mathbf{X}_1, \mathbf{y}_1)$  и  $p(\mathbf{w}_2|\mathbf{X}_2, \mathbf{y}_2)$  есть  $g_1(\mathbf{w})$  и  $g_2(\mathbf{w})$  соответственно.

**Требуется:** построить функцию близости, определенную на паре распределений  $g_1(\mathbf{w})$  и  $g_2(\mathbf{w})$ . Требования к функции близости изложены далее.



## Требования

- 1 Определена в случае несовпадения носителей.
- 2  $s(g_1, g_2) \leq s(g_1, g_1)$ .
- 3  $s \in [0, 1]$ .
- 4  $s(g_1, g_1) = 1$ .
- 5 Близка к 1, если  $g_2(\mathbf{w})$  малоинформативное распределение.
- 6 Симметрична:  $s(g_1, g_2) = s(g_2, g_1)$ .

## Теорема

Расстояния Кульбака-Лейблера, Хеллингера, Дженсона-Шеннона, Бхаттачарая не удовлетворяют требованиям к функции сходства распределений.

## Случай 1, 2

Расстояние Кульбака-Лейблера и Дженсона-Шеннона

$$D_{KL}(g_1, g_2) = \int g_1(\mathbf{w}) \log \frac{g_1(\mathbf{w})}{g_2(\mathbf{w})} d\mathbf{w}$$

$D_{JS}(g_1, g_2) = \frac{1}{2}D_{KL}(g_1, \frac{1}{2}(g_1 + g_2)) + \frac{1}{2}D_{KL}(g_2, \frac{1}{2}(g_1 + g_2))$  не удовлетворяют требованиям к функции сходства.

## Доказательство

- 1  $D_{KL} = \infty$ , если  $g_1(x) \neq 0$ ,  $g_2(x) = 0$  на множестве ненулевой меры относительно  $g_1$ .
- 2  $D_{KL}(g_1, g_2) \neq D_{KL}(g_2, g_1)$ .
- 3  $D_{KL} \rightarrow \infty$ , например, для пары нормальных распределений  $N(0, 1)$  и  $N(0, \sigma^2)$  при  $\sigma^2 \rightarrow \infty$ .
- 4  $D_{JS} \not\rightarrow 0$ , например, для пары нормальных распределений  $N(0, 1)$  и  $N(0, \sigma^2)$  при  $\sigma^2 \rightarrow \infty$ .

## Случай 3, 4

Расстояние Хеллингера и Бхаттачарайа

$$D_H(g_1, g_2) = 1 - \int \sqrt{g_1(\mathbf{w})g_2(\mathbf{w})}d\mathbf{w}$$

$D_B(g_1, g_2) = -\log \int \sqrt{g_1(\mathbf{w})g_2(\mathbf{w})}d\mathbf{w}$  не удовлетворяют требованиям к функции сходства.

## Доказательство

Обе меры не имеют требуемого свойства для малоинформативных распределений:

$$D_H(g_1, g_2) \rightarrow 1, D_B(g_1, g_2) \rightarrow \infty.$$

В качестве меры сходства распределения предлагается мера сходства  $s$ -score:

$$s(g_1, g_2) = \frac{\int_{\mathbf{w}} g_1(\mathbf{w})g_2(\mathbf{w})d\mathbf{w}}{\max_{\mathbf{b}} \int_{\mathbf{w}} g_1(\mathbf{w} - \mathbf{b})g_2(\mathbf{w})d\mathbf{w}}.$$

**Теорема 1 (Адуенко, 2014).** Предлагаемая функция сходства удовлетворяет всем требованиям к функции сходства.

Примеры:

$g_1(\mathbf{w})$	$g_2(\mathbf{w})$	$s(g_1, g_2)$
$U[0, 1]$	$U[0.5, 1.5]$	0.5
$U[0, 1]$	$U[0., 1.]$	1
$N(0, 1)$	$N(10, 10^{10})$	1

# Выражение для $s(g_1, g_2)$ для пары нормальных распределений

## Теорема 2 (Адуенко, 2014)

Пусть  $g_1 = N(\mathbf{v}_1, \Sigma_1)$ ,  $g_2 = N(\mathbf{v}_2, \Sigma_2)$ . Тогда выражение для  $s(g_1, g_2)$  имеет вид

$$s(g_1, g_2) = \exp \left[ \frac{1}{2} (\Sigma_1^{-1} \mathbf{v}_1 + \Sigma_2^{-1} \mathbf{v}_2)^\top (\Sigma_1^{-1} + \Sigma_2^{-1})^{-1} (\Sigma_1^{-1} \mathbf{v}_1 + \Sigma_2^{-1} \mathbf{v}_2) - \frac{1}{2} \mathbf{v}_1^\top \Sigma_1^{-1} \mathbf{v}_1 - \frac{1}{2} \mathbf{v}_2^\top \Sigma_2^{-1} \mathbf{v}_2 \right].$$

**Следствие 1** В случае  $\Sigma_2 = \mathbf{0}$  выражение для s-score

$$s(g_1, g_2) = \exp \left[ -\frac{1}{2} (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1)^\top \Sigma_1^{-1} (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \right].$$

**Следствие 2** (упрощение выражения для s-score).

Для случае пары нормальных распределений параметров выражение для s-score имеет следующий вид

$$s(g_1, g_2) = \exp \left( -\frac{1}{2} (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)^\top (\Sigma_1 + \Sigma_2)^{-1} (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \right).$$

# Распределение $s$ -score в условии истинности гипотезы о совпадении моделей

**Теорема 3 (Адуенко, 2014)** Пусть

- Модели  $f_1$  и  $f_2$  совпадают, то есть  $\mathbf{w}_1 = \mathbf{w}_2 = \mathbf{w}$ .
- Апостериорное распределение  $\mathbf{w}_1$ , полученное по  $(\mathbf{X}_1, \mathbf{y}_1)$ , есть  $\hat{\mathbf{w}}_1 \sim N(\mathbf{w}_1 | \mathbf{w}, \Sigma_1)$
- $m_2 = \infty$ , откуда  $\hat{\mathbf{w}}_2 = \mathbf{w}$ .

Тогда выражение для  $s$ -score двух моделей имеет вид

$$s(g_1, g_2) = \exp \left[ -1/2(\hat{\mathbf{w}}_1 - \mathbf{w})^T \Sigma_1^{-1}(\hat{\mathbf{w}}_1 - \mathbf{w}) \right],$$

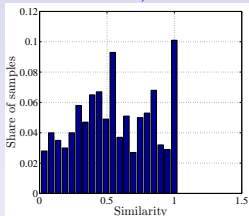
причем  $s \sim \exp[-1/2\xi]$ , где  $\xi \sim \chi^2(n)$ ,  $n$  – число признаков.

**Следствие 1.** Для случая  $n = 2$   $s$ -score имеет равномерное распределение на отрезке  $[0, 1]$ .

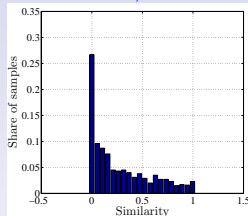
# Иллюстрация применения s-score для сравнения двух моделей, $\rho = 0.9$

Рассмотрим две близкие в терминах  $\|\mathbf{w}_1 - \mathbf{w}_2\|$  модели,  
 $\|\mathbf{w}_1\| = \|\mathbf{w}_2\| = 1$ ,  $\text{corr}(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2) = \rho$ .

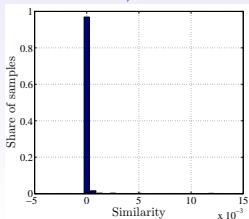
$N_1 = 10000$ ,  $N_2 = 10$



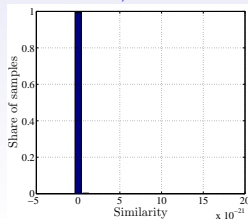
$N_1 = 10000$ ,  $N_2 = 100$



$N_1 = 10000$ ,  $N_2 = 1000$



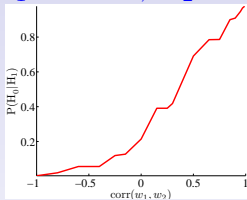
$N_1 = 10000$ ,  $N_2 = 10000$



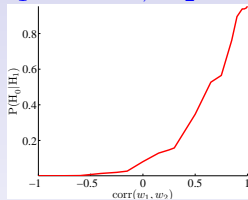
# Зависимость $P(H_0|H_1)$ от корреляции между истинными параметрами двух моделей.

Рассмотрим две близкие в терминах  $\|\mathbf{w}_1 - \mathbf{w}_2\|$  модели,  
 $\|\mathbf{w}_1\| = \|\mathbf{w}_2\| = 1$ ,  $\text{corr}(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2) = \rho$ .

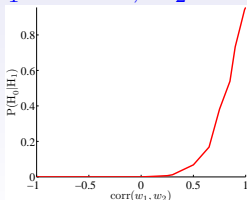
$N_1 = 10000$ ,  $N_2 = 30$



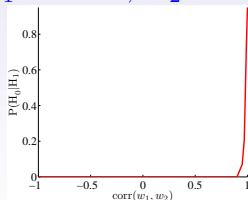
$N_1 = 10000$ ,  $N_2 = 50$



$N_1 = 10000$ ,  $N_2 = 100$



$N_1 = 10000$ ,  $N_2 = 1000$





# Обобщение теоремы о распределении s-score на случай двух конечных выборок

**Теорема 4 (Адуенко, 2014).** Пусть для ковариационных матриц параметров моделей имеем  $\Sigma_2 \ll \Sigma_1$ , то есть  $\|\Sigma_2\| \cdot \|\Sigma_1^{-1}\| \ll 1$ . Тогда

$$2 \log(s(g_1, g_2)) \xrightarrow{\text{с.к.}} -(\mathbf{v}_1 - \mathbf{w})^\top \Sigma_1^{-1} (\mathbf{v}_1 - \mathbf{w}) \text{ при } \|\Sigma_2\| \rightarrow 0,$$

$$s(g_1, g_2) \xrightarrow{p} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{v}_1 - \mathbf{w})^\top \Sigma_1^{-1} (\mathbf{v}_1 - \mathbf{w})\right) \text{ при } \|\Sigma_2\| \rightarrow 0.$$

**Следствие 1.** При выполнении условий теоремы выполнено

$$2 \log(s(g_1, g_2)) \xrightarrow{p} -(\mathbf{v}_1 - \mathbf{w})^\top \Sigma_1^{-1} (\mathbf{v}_1 - \mathbf{w}) \text{ при } \|\Sigma_2\| \rightarrow 0.$$

**Следствие 2.** При выполнении условий теоремы выполнено

$$-2 \log(s(g_1, g_2)) \xrightarrow{d} \chi^2(n) \text{ при } \|\Sigma_2\| \rightarrow 0, \text{ где}$$

$n$  – число признаков в модели.

**Теорема 5 (Адуенко, 2014).** Пусть модели, задаваемые  $(\mathbf{v}_1, \Sigma_1)$  и  $(\mathbf{v}_2, \Sigma_2)$  считаются разными, если

$$s(N(\mathbf{v}_1, \Sigma_1), N(\mathbf{v}_2, \Sigma_2)) \leq C \in (0, 1).$$

Тогда, если указанные модели разные по приведенному критерию, то

- Модели, задаваемые  $(\mathbf{v}_1, \Sigma_1)$  и  $(\mathbf{v}_2, \mathbf{O})$  будут разными согласно приведенному критерию.
- Модели, задаваемые  $(\mathbf{v}_1, \Sigma_1)$  и  $(\mathbf{v}_2, \lambda\Sigma_2)$ ,  $\lambda \in [0, 1]$  будут разными согласно приведенному критерию.

**Теорема 6 (Адуенко, 2014).** Пусть рассматриваются  $K$  моделей с  $\|\mathbf{v}_1\| = \dots = \|\mathbf{v}_K\| = \lambda_1 > 0$  и  $\Sigma_1 = \dots = \Sigma_K = \lambda_2 \mathbf{I}$ . В качестве критерия отличимости моделей рассматривается следующий: модели с номерами  $i \neq j$  разные, если

$$s(N(\mathbf{v}_i, \Sigma_i), N(\mathbf{v}_j, \Sigma_j)) \leq C \in (0, 1).$$

Тогда максимальное число попарно различных моделей, которое может быть в наборе, есть

$$K_{\max} = \sqrt{\pi} \frac{n\Gamma(\frac{n+1}{2})}{(n-1)\Gamma(\frac{n}{2} + 1)} \frac{1}{\int_0^{\theta/2} \sin^{n-2} \varphi d\varphi},$$

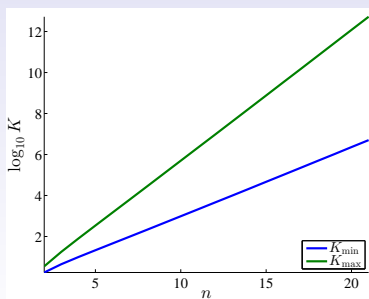
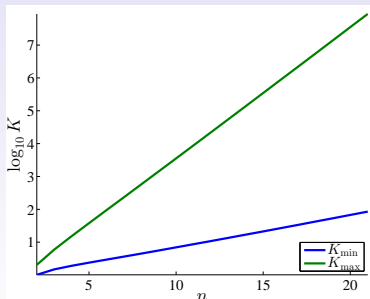
Здесь  $\theta \in [0, \pi]$ ,  $\cos \theta = \rho = \max(-1, 1 + 2\lambda_2/\lambda_1^2 \ln C)$ ,  $n$  – размерность признакового пространства. При этом можно построить  $K_{\min}$  попарно различных моделей, где

$$K_{\min} = \sqrt{\pi} \frac{n\Gamma(\frac{n+1}{2})}{(n-1)\Gamma(\frac{n}{2} + 1)} \frac{1}{\int_0^{\theta} \sin^{n-2} \varphi d\varphi},$$

**Теорема 6 (продолжение)** При  $C$ , близком к 1, имеем

$$K_{\max} \approx \sqrt{\pi} \frac{n\Gamma(\frac{n+1}{2})}{(n-1)\Gamma(\frac{n}{2}+1)} \frac{2^{\frac{n-1}{2}}}{(1-\rho)^{\frac{n-1}{2}}}.$$

$$K_{\min} \approx \sqrt{\pi} \frac{n\Gamma(\frac{n+1}{2})}{(n-1)\Gamma(\frac{n}{2}+1)} \frac{1}{2^{\frac{n-1}{2}}(1-\rho)^{\frac{n-1}{2}}}.$$



- 1 Адуенко А. А. Выбор признаков и шаговая логистическая регрессия для задачи кредитного скоринга // Машинное обучение и анализ данных, 2012. № 3. С. 279–291.
- 2 Адуенко А. А., Кузьмин А. А., Стрижов В. В. Выбор признаков и оптимизация метрики при кластеризации коллекции документов // Известия ТулГУ, 2012. № 3. С. 119–131.
- 3 Адуенко А. А., Стрижов В. В. Алгоритм оптимального расположения названий коллекции документов // Программная инженерия, 2013. № 3. С. 21–25.
- 4 Иванова А. В., Адуенко А. А., Стрижов В. В. Алгоритм построения логических правил при разметке текстов // Программная инженерия, 2013. № 6. С. 41–45.
- 5 Адуенко А. А., Стрижов В. В. Совместный выбор объектов и признаков в задачах многоклассовой классификации коллекции документов // Инфокоммуникационные технологии, 2014. № 1. С. 47–53.
- 6 А. А. Кузьмин, А. А. Адуенко, В. В. Стрижов Тематическая классификация тезисов крупной конференции с использованием экспертной модели // Информационные технологии, 2014. № 6.

- Предложен метод отбора объектов и его эффективное обобщение на случай смесей и многоуровневых моделей.
- Предложен алгоритм отбора признаков, основанный на оценке ковариационной матрицы параметров с помощью максимизации обоснованности модели.
- Построена функция  $s$ -score, которая позволяет оценить близость двух моделей. Доказаны асимптотические свойства сходимости  $s(g_1, g_2)$  и  $\log(s(g_1, g_2))$ .
- С помощью введенной  $s$ -score получены верхняя и нижняя оценка на число попарно различных моделей.

## Дальнейшие планы

- Рассмотреть структурные ограничения на ковариационную матрицу в алгоритме отбора признаков.
- Обобщить отбор признаков на многоклассовый случай
- Доказать свойства асимптотической сходимости при условии неизвестных  $\Sigma_1$  и  $\Sigma_2$
- Получить оценки на число моделей в случае недиагональных ковариационных матриц моделей.