

УДК 519.6

Обучение и оценка обобщающей способности методов интерполяции

Ю. Н. Бахвалов, И. В. Копылов

ООО «Малленом системс»,
Россия, 162610, г. Череповец, ул. Metallургов, д. 21б
E-mail: holbah@mail.ru, ivv.kopylov@gmail.com

Получено 9 апреля 2015 г.,
после доработки 24 июня 2015 г.

В данной статье исследуются методы машинного обучения с определенным видом решающего правила. К ним относятся интерполяция по методу обратно взвешенных расстояний, метод интерполяции радиальными базисными функциями, метод многомерной интерполяции и аппроксимации на основе теории случайных функций, кригинг. Показано, что для данных методов существует способ быстрого переобучения «модели» при добавлении новых данных к существующим. Под «моделью» понимается построенная по обучающим данным интерполирующая или аппроксимирующая функция. Данный подход позволяет уменьшить вычислительную сложность построения обновленной «модели» с $O(n^3)$ до $O(n^2)$. Также будет исследована возможность быстрого оценивания обобщающих возможностей «модели» на обучающей выборке при помощи метода скользящего контроля leave-one-out cross-validation, устранив главный недостаток такого подхода — необходимость построения новой «модели» при каждом удалении элемента из обучающей выборки.

Ключевые слова: машинное обучение, интерполяция, случайная функция, система линейных уравнений, кросс-валидация.

Training and assessment the generalization ability of interpolation methods

U. N. Bakhvalov, I. V. Kopylov

Ltd. «Mallenom Systems», 21b Metallurgov st., Cherepovets, 162610, Russia

Abstract. — We investigate machine learning methods with a certain kind of decision rule. In particular, inverse-distance method of interpolation, method of interpolation by radial basis functions, the method of multi-dimensional interpolation and approximation, based on the theory of random functions, the last method of interpolation is kriging. This paper shows a method of rapid retraining “model” when adding new data to the existing ones. The term “model” means interpolating or approximating function constructed from the training data. This approach reduces the computational complexity of constructing an updated “model” from $O(n^3)$ to $O(n^2)$. We also investigate the possibility of a rapid assessment of generalizing opportunities “model” on the training set using the method of cross-validation leave-one-out cross-validation, eliminating the major drawback of this approach — the necessity to build a new “model” for each element which is removed from the training set.

Keywords: machine learning, interpolation, random function, the system of linear equations, cross-validation.

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2015, vol. 7, no. 5, pp. 1023–1031 (Russian).

рицы $K_{(k+1) \times (k+1)}^{*-1}$ (то же самое касается удаления x_i элемента из выборки). В данной статье будет представлен способ получения K^{*-1} без прямого ее вычисления.

Также будет показана возможность быстрого оценивания обобщающих возможностей «модели» на выборке при помощи метода скользящего контроля leave-one-out cross-validation [Kohavi, 1995; Скользящий контроль]. Будет показано, что при удалении элемента x_i нет необходимости обучать «модель» заново на оставшейся выборке, т. е. решать систему уравнений наподобие (2), чтобы протестировать ее результат на входном элементе x_i . Предложенный подход сильно сократит количество операций, необходимых для проведения теста на всей выборке x_1, x_2, \dots, x_k ($x_i \in R^n$).

Добавление нового обучающего элемента и нахождение обратной матрицы

Пусть к обучающей выборке добавляется элемент x_{k+1} с соответствующим значением y_{k+1} , тогда новая матрица K примет вид

$$K^* = \begin{bmatrix} K & r \\ r^T & r_{k+1} \end{bmatrix}, \quad (8)$$

где

$$r = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_f(x_1 - x_{k+1}) \\ K_f(x_2 - x_{k+1}) \\ \vdots \\ K_f(x_k - x_{k+1}) \end{bmatrix}, \quad r_{k+1} = K_f(x_{k+1} - x_{k+1}). \quad (9)$$

Чтобы понять, как будет выглядеть обратная матрица для K^* , рассмотрим взаимосвязь между K^{-1} и K^{*-1} . Запишем K^{*-1} как

$$K^{*-1} = \begin{bmatrix} K^{-1} & O_k \\ O_k^T & 0 \end{bmatrix} + D, \quad (10)$$

где

$$O_k = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}_{k \times 1}, \quad (11)$$

$$D = \begin{bmatrix} d_{1,1} & d_{1,2} & \dots & d_{1,k} & d_1^* \\ d_{2,1} & d_{2,2} & \dots & d_{2,k} & d_2^* \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ d_{k,1} & d_{k,2} & \dots & d_{k,k} & d_k^* \\ d_1^* & d_2^* & \dots & d_k^* & d_{k+1}^* \end{bmatrix}, \quad (12)$$

D — симметричная матрица, т. к. K , K^{-1} , K^{*-1} симметричны.

Перепишем матрицу (12) в виде (13):

$$D = [d^1 \quad d^2 \quad \dots \quad d^{k+1}], \quad (13)$$

где d^i ($i=1, \dots, k+1$) — вектор-столбцы.

Из свойств матриц:

$$K^* \cdot K^{*-1} = I, \quad (14)$$

где I — единичная матрица:

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}_{(k+1) \times (k+1)}. \quad (15)$$

Распишем формулу (14). Опираясь на (8) и (10), получим

$$\begin{bmatrix} K & r \\ r^T & r_{k+1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} K^{-1} & O_k \\ O_k^T & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} K & r \\ r^T & r_{k+1} \end{bmatrix} \cdot D = I. \quad (16)$$

Первое слагаемое в левой части уравнения (16) можно представить в следующем виде:

$$\begin{bmatrix} K & r \\ r^T & r_{k+1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} K^{-1} & O_k \\ O_k^T & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E & O_k \\ r^T \cdot K^{-1} & 0 \end{bmatrix}, \quad (17)$$

где E — единичная матрица:

$$E = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}_{k \times k}. \quad (18)$$

Перенеся первое слагаемое в (16) за знак равенства и используя (17), получим следующее:

$$\begin{bmatrix} K & r \\ r^T & r_{k+1} \end{bmatrix} \cdot D = \begin{bmatrix} O^* & O_k \\ -r^T \cdot K^{-1} & 1 \end{bmatrix}. \quad (19)$$

Возьмем D из (13):

$$\begin{bmatrix} K & r \\ r^T & r_{k+1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} d^1 & d^2 & \dots & d^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} O^* & O_k \\ -r^T \cdot K^{-1} & 1 \end{bmatrix}, \quad (20)$$

где O_k — вектор-столбец нулей (11), а O^* — квадратная матрица нулей:

$$O^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}_{k \times k}. \quad (21)$$

Найдем значения всех элементов последнего столбца D (а соответственно, и последней строки, т. к. D — симметричная матрица). Запишем вектор-столбец d^{k+1} из D как

$$d^{k+1} = \begin{bmatrix} d^* \\ d_{k+1}^* \end{bmatrix}, \quad (22)$$

который состоит из вектор-столбца d^* , который представлен в виде формулы (22) и скалярного значения d_{k+1}^* .

$$d^* = \begin{bmatrix} d_1^* \\ d_2^* \\ \vdots \\ d_k^* \end{bmatrix}. \quad (23)$$

Из (20) получается

$$\begin{bmatrix} K & r \\ r^T & r_{k+1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} d^* \\ d_{k+1}^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} O_k \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (24)$$

Из (24) можно вывести следующую систему уравнений, решив которую найдем значения элементов столбца d^{k+1} матрицы D :

$$\begin{cases} K \cdot d^* = -r \cdot d_{k+1}^*, \\ r^T \cdot d^* + r_{k+1} \cdot d_{k+1}^* = 1, \end{cases} \quad (25)$$

$$\begin{cases} d^* = -K^{-1} \cdot r \cdot d_{k+1}^*, \\ -(r^T \cdot K^{-1} \cdot r) \cdot d_{k+1}^* + r_{k+1} \cdot d_{k+1}^* = 1, \end{cases} \quad (26)$$

$$d_{k+1}^* = \frac{1}{r_{k+1} - (r^T \cdot K^{-1} \cdot r)}, \quad (27)$$

$$d^* = -K^{-1} \cdot r \cdot d_{k+1}^* = \frac{-K^{-1} \cdot r}{(r^T \cdot K^{-1} \cdot r) - r_{k+1}}. \quad (28)$$

Далее найдем целиком матрицу D . Используя (8) и умножив в (20) правую и левую части на K^{*-1} , получим:

$$\begin{bmatrix} d^1 & d^2 & \dots & d^{k+1} \end{bmatrix} = K^{*-1} \cdot \begin{bmatrix} O^* & O_k \\ -r^T \cdot K^{-1} & 1 \end{bmatrix}. \quad (29)$$

Если представить K^{*-1} в виде (10), то

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} d^1 & d^2 & \dots & d^{k+1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} K^{-1} & O_k \\ O_k^T & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} O^* & O_k \\ -r^T \cdot K^{-1} & 1 \end{bmatrix} + \\ &+ \begin{bmatrix} d^1 & d^2 & \dots & d^{k+1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} O^* & O_k \\ -r^T \cdot K^{-1} & 1 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (30)$$

Первое слагаемое справа от знака равенства в уравнении (30) равно нулевой матрице. Запись второго слагаемого также можно сократить, в результате получаем

$$D = \begin{bmatrix} d^1 & d^2 & \dots & d^{k+1} \end{bmatrix} = d^{k+1} \cdot \begin{bmatrix} -r^T \cdot K^{-1} & 1 \end{bmatrix}. \quad (31)$$

Так как матрица K^{-1} симметричная, то формулу (28) можно представить следующим образом:

$$d^{*T} \cdot \frac{1}{d_{k+1}^*} = -r^T \cdot K^{-1}. \quad (32)$$

Используя полученную формулу (32), матрицу D можно записать так:

$$D = d^{k+1} \cdot \begin{bmatrix} d^{*T} \cdot \frac{1}{d_{k+1}^*} & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{d_{k+1}^*} \cdot (d^{k+1} \cdot d^{k+1T}). \quad (33)$$

Если вернуться к уравнению (10) и подставить туда найденную матрицу D , то в результате найдем обратную матрицу K^{*-1} :

$$K^{*-1} = \begin{bmatrix} K^{-1} & O_k \\ O_k^T & 0 \end{bmatrix} + D = \begin{bmatrix} K^{-1} & O_k \\ O_k^T & 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{d_{k+1}^*} \cdot (d^{k+1} \cdot d^{k+1T}), \quad (34)$$

где d_{k+1}^* из (27).

Зная эту матрицу, можно построить новую «модель», т. е. найти искомую интерполирующую функцию, которая будет учитывать новый добавленный элемент (x_{k+1}, y_{k+1}) . При таком подходе сложность вычислений при нахождении K^{*-1} составляет $O(n^2)$, в то время как сложность прямого вычисления матрицы K^{*-1} составляет $O(n^3)$.

Кросс-валидация по отдельным объектам выборки

Во многих случаях необходимо провести оценку качества результатов интерполяции, полученных тем или иным методом. Процесс оценки представляет собой сравнение оцененных значений с действительными известными значениями в узлах интерполяции. Этот процесс называется валидацией метода. Во многих случаях в наличии нет данных для проведения независимой валидации, имеются только те данные, на основании которых строилась «модель». Кросс-валидация (cross-validation) позволяет проводить анализ модели, используя только такие данные. Проведение подобного процесса оценки качества «модели» является достаточно дорогой процедурой с точки зрения затрат времени на вычисления, т. к. приходится строить «модель» заново ровно столько раз, сколько обучающих данных.

Покажем, как можно провести оценку обобщающих способностей обученной «модели» с помощью процедуры скользящего контроля leave-one-out cross-validation [Kohavi, 1995; Скользящий контроль] без необходимости постоянного переобучения «модели» при исключении из обучающей выборки элемента (x_i, y_i) .

Рассмотрим две выборки эмпирических данных: исходную выборку $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_k, y_k)$, где $(x_i \in R^n, y_i \in R)$, и ту же выборку, но с добавленным элементом (x_{k+1}, y_{k+1}) , $(x_i \in R^n, y_i \in R)$.

Обозначим Y^* как

$$Y^* = \begin{bmatrix} Y \\ y_{k+1} \end{bmatrix}, \text{ где } Y \text{ из (5)}. \quad (35)$$

Обозначим набор коэффициентов обученной «модели» Q^* по всем $k+1$ элементам как

$$Q^* = \begin{bmatrix} q_1^* \\ q_2^* \\ \vdots \\ q_{k+1}^* \end{bmatrix}, \quad (36)$$

которые могут быть получены решением следующей системы:

$$Q^* = K^{*-1}Y^*. \quad (37)$$

В результате имеем две функции (две «модели»): $f_1(x)$, полученную на выборке из k элементов, и $f_2(x)$, полученную на и выборке с добавленным $(k+1)$ -м элементом (рис. 1).

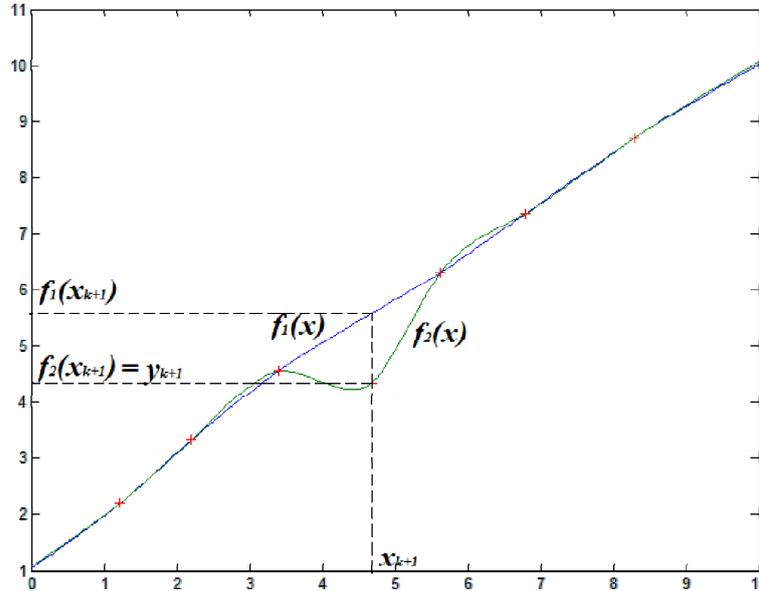


Рис. 1. Изображения графиков функций $f_1(x)$ и $f_2(x)$

Рассмотрим значения функций f_1 и f_2 в узле x_{k+1} . Из формул (1), (4), (7) и (9) следует

$$f_1(x_{k+1}) = q_1 K_f(x_{k+1} - x_1) + q_2 K_f(x_{k+1} - x_2) + \dots + q_k K_f(x_{k+1} - x_k) = r^T \cdot (K^{-1} \cdot Y), \quad (38)$$

$$f_2(x_{k+1}) = \begin{bmatrix} r^T & r_{k+1} \end{bmatrix} \cdot K^{*-1} \cdot Y^* = r^T \cdot (K^{-1} \cdot Y) + \begin{bmatrix} r^T & r_{k+1} \end{bmatrix} \cdot D \cdot Y^*. \quad (39)$$

Значение $f_2(x_{k+1}) = y_{k+1}$. Рассмотрим разность значений функций f_2 и f_1 в узле x_{k+1} :

$$\begin{aligned} f_2(x_{k+1}) - f_1(x_{k+1}) &= \begin{bmatrix} r^T & r_{k+1} \end{bmatrix} \cdot D \cdot Y^* = \\ &= \begin{bmatrix} r^T & r_{k+1} \end{bmatrix} \cdot d_{k+1}^* \cdot \begin{bmatrix} -K^{-1} \cdot r \\ 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -r^T \cdot K^{-1} & 1 \end{bmatrix} \cdot Y^*. \end{aligned} \quad (40)$$

Перепишем последнюю часть (40) как

$$f_2(x_{k+1}) - f_1(x_{k+1}) = \begin{bmatrix} r^T & r_{k+1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -K^{-1} \cdot r \\ 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -r^T \cdot K^{-1} & 1 \end{bmatrix} \cdot d_{k+1}^* \cdot Y^*. \quad (41)$$

Для упрощения введем следующие обозначения:

$$A = \begin{bmatrix} r^T & r_{k+1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -K^{-1} \cdot r \\ 1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} -r^T \cdot K^{-1} & 1 \end{bmatrix} \cdot d_{k+1}^*. \quad (42)$$

Отсюда (40) будет выглядеть следующим образом:

$$f_2(x_{k+1}) - f_1(x_{k+1}) = A \cdot B \cdot Y^*. \quad (43)$$

Используя (27), получим

$$A = \begin{bmatrix} r^T & r_{k+1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -K^{-1} \cdot r \\ 1 \end{bmatrix} = -r^T \cdot K^{-1} \cdot r + r_{k+1} = \frac{1}{d_{k+1}^*}. \quad (44)$$

Из первого уравнения в системе (26) и из симметричности матрицы K^{-1} получим, что

$$d^{*T} = -r^T \cdot K^{-1} \cdot d_{k+1}^*, \quad (45)$$

отсюда

$$B = \begin{bmatrix} -r^T \cdot K^{-1} & 1 \end{bmatrix} \cdot d_{k+1}^* = \begin{bmatrix} d^{*T} & d_{k+1}^* \end{bmatrix} = (d^{k+1})^T. \quad (46)$$

Из (43), (44), (46) получаем разность между значениями функций f_1 и f_2 в точке x_{k+1} :

$$f_1(x_{k+1}) - f_2(x_{k+1}) = (-r^T \cdot K^{-1} \cdot r + r_{k+1}) \cdot d^{k+1T} \cdot Y^* = \frac{q_{k+1}^*}{d_{k+1}^*}, \quad (47)$$

где q_{k+1}^* из (36), d_{k+1}^* из (12).

Так как $f_2(x_{k+1}) = y_{k+1}$, получим следующее значение функции f_1 в точке x_{k+1} :

$$f_1(x_{k+1}) = y_{k+1} - \frac{q_{k+1}^*}{d_{k+1}^*}. \quad (48)$$

Таким образом, получается, что значение функции f_1 в точке x_i будет равно разности между y_i и значением отношения q_i^* коэффициента «модели» к i -му ($i = 1, \dots, (k+1)$) элементу на главной диагонали матрицы K^{*-1} :

$$f_1(x_i) = y_i - \frac{q_i^*}{d_i^*}. \quad (49)$$

Формула (49) дает возможность провести кросс-валидацию, используя принцип из [Kohavi, 1995; Скользящий контроль], на любом i -м ($i = 1, \dots, (k+1)$) элементе обучающей выборки, без явного его удаления из выборки и необходимости заново пересчитывать коэффициенты «модели».

Заключение

В данной статье показано, что для методов машинного обучения, таких как интерполяция по методу обратно взвешенных расстояний, метод интерполяции радиальными базисными функциями, метод многомерной интерполяции и аппроксимации на основе теории случайных функций, кригинг, существует возможность быстрого пересчета обратной матрицы при добавлении новых данных для обучения, а следовательно, более быстрого способа нахождения коэффициентов для функции (1).

Кроме того, показано, что методы обладают возможностью быстрого выполнения кросс-валидации при помощи метода скользящего контроля leave-one-out cross-validation поэлементно по формуле (49).

Список литературы

Бахвалов Ю. Н., Зуев А. Н., Ширабакина Т. А. Метод распознавания образов на основе теории случайных функций // Известия вузов. Приборостроение. — 2005. — Т. 48, № 2. — С. 5–8. Спб.

- Бахвалов Ю. Н., Малыгин Л. Л., Черкас П. С.* Метод машинного обучения на основе алгоритма многомерной интерполяции и аппроксимации случайных функций // Вестник Череповецкого государственного университета. — 2012. — Т. 2, № 2. — С. 7–9.
- Кошель С. М., Мусин О. Р.* Методы цифрового моделирования: кригинг и радиальная интерполяция // Информационный бюллетень ГИС-Ассоциации. № 2, 2000. № 2, №4(26)–5(27). — С. 32–33. — 2001. — №1(28). — С. 58. — №2(29)–3(30). — С. 23–24.
- Скользющий контроль (последнее редактирование 15 февраля 2010): URL: <http://www.machine-learning.ru/wiki/index.php?title=Кросс-валидация>
- Kohavi R.* A Study of Cross-Validation and Bootstrap for Accuracy Estimation and Model Selection // Computer Science Department, Stanford University. — 1995. — P. 2–3.
- Robeson S. M.* Spherical Methods for Spatial Interpolation: Review and Evaluation // Cartography and Geographic Information Systems. — 1997. — Vol. 24, No. 1. — P. 3–20.