

WASSERSTEIN-РЕГРЕССИЯ КАК ВАРИАЦИОННАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ВЕРОЯТНОСТНЫХ ТРАЕКТОРИЙ ЧЕРЕЗ БАЗИС БЕРНШТЕЙНА

Маслов М.И.¹

Научный руководитель – канд. техн. наук, доцент Кугаевских А.В.¹

¹Университет ИТМО

max-mas02@yandex.ru

Введение

Современные задачи машинного обучения всё чаще требуют перехода от прогнозирования точечных значений к моделированию целых распределений, что особенно актуально в областях, где важна оценка неопределённости [1]. Классические методы регрессии оказываются недостаточными, когда целевая переменная является случайной величиной со сложной структурой зависимости от входных признаков, что привело к активному развитию направления регрессии над распределениями [2]. Существующие подходы либо игнорируют геометрию пространства вероятностных мер, либо обладают высокой вычислительной сложностью, либо требуют больших объёмов данных для надёжной оценки плотности [3, 4]. В данной работе предлагается метод Wasserstein-регрессии, который объединяет преимущества параметризации на основе базиса Бернштейна и геометрически мотивированной минимизации Wasserstein-расстояния. Основная цель заключается в построении гладкой вероятностной траектории, аппроксимирующей условное распределение отклика. Научная новизна работы заключается в синтезе идей вариационной аппроксимации, геометрии оптимального транспорта и параметрического моделирования. Предложенный метод обеспечивает интерпретируемость благодаря явному заданию контрольных точек траектории, вычислительную эффективность и устойчивость на сложных нелинейных зависимостях.

Основная часть

Основная идея метода состоит в том, чтобы представить предсказанное семейство распределений как гладкую вероятностную траекторию, параметризованную через базис Бернштейна. Пусть наблюдения заданы набором пар (x_i, y_i) , где x_i — скалярный вход, а y_i — векторный отклик. Модель строит параметрическую аппроксимацию семейства распределений по метрике W_2 (квадратичное расстояние Wasserstein). Для каждой компоненты смеси k задаётся набор контрольных точек, а предсказание среднего и ковариации вычисляются как взвешенная сумма по базисным полиномам Бернштейна степени n . Функция потерь представляет собой усреднённое квадратичное W_2 -расстояние между предсказанными гауссовскими распределениями и эмпирическими данными. Аналитическая формула для квадрата W_2 -расстояния между двумя многомерными гауссианами $N(\mu_1, \Sigma_1)$ и $N(\mu_2, \Sigma_2)$ включает норму разности средних и след матрицы, зависящей от квадратных корней ковариационных матриц. Для обучения используется оптимизатор Adam с автоматическим дифференцированием. Эмпирические распределения в дискретных точках аппроксимируются гауссианами с малой регуляризующей ковариацией для численной устойчивости.

Выводы

Для оценки предложенного метода проведена серия экспериментов на синтетических наборах данных. Сравнение проводилось с полиномиальной регрессией, гауссовским процессом (GPR), моделью смесей плотностей (MDN) и регрессией через

барицентры Вассерштейна (WBR). Результаты показали, что предложенный метод Wasserstein-регрессии на основе базиса Бернштейна обеспечивает конкурентоспособное качество аппроксимации вероятностных траекторий на данных различной сложности. Особенно заметное преимущество достигается на фигурах с выраженной нелинейностью: на наборе «Фигура Лиссажу» метод превзошёл все конкуренты по W_2 -расстоянию и RMSE. В трёхмерном случае (торический узел) модель показала результаты, близкие к лучшим. В отличие от GPR и MDN, модель не требует тюнинга гиперпараметров и сохраняет стабильную сходимость. Дальнейшая работа будет направлена на расширение класса моделируемых распределений за счёт включения не-гауссовских аппроксимаций, применение энтропийной регуляризации и адаптацию подхода для многомерных данных. Практическая значимость работы — в потенциале применения в задачах прогнозирования с оценкой неопределённости, анализе временных рядов, робототехнике, биоинформатике и финансовой аналитике.

Литература

1. Chen Y., Lin Z., Müller H. G. Wasserstein Regression // Journal of the American Statistical Association. 2023. Vol. 118. Issue 542. P. 869-882. – Режим доступа: <https://www.gazeta.ru/tech/news/2023/12/23/21989557.shtml> (Дата обращения 10.03.2024).
2. Okano R., Imaizumi M. Distribution-on-distribution regression with Wasserstein metric: Multivariate Gaussian case // Journal of Multivariate Analysis. 2024. Vol. 203. Issue 105334.
3. Meunier D., Pontil M., Ciliberto C. Distribution regression with sliced Wasserstein kernels // Proceedings of the 39th International Conference on Machine Learning (ICML 2022). 2022. Vol. 162. P. 15501-15523.
4. Belbasi R., Selvi A., Wiesemann W. It's All in the Mix: Wasserstein Classification and Regression with Mixed Features // arXiv preprint arXiv:2312.12230. 2025. – Режим доступа: <https://arxiv.org/html/2312.12230v3>, свободный. (дата обращения: 26.10.2025).
5. Zhou Y., Müller H. G. Wasserstein Regression with Empirical Measures and Density Estimation for Sparse Data // arXiv preprint arXiv:2308.12540. 2023. – Режим доступа: <https://arxiv.org/abs/2308.12540>, свободный. (дата обращения: 26.10.2025).
6. Kneib T., Silbersdorff A., Säfken B. Rage against the mean: a review of distributional regression approaches // Econometrics and Statistics. 2023. Vol. 26. P. 99-123.
7. Cherfaoui F., Kadri H., Sandrine A., Ralaivola L. A Discrete RKHS Standpoint for Nyström MMD // hal.science preprint hal-03651849. 2022. – Режим доступа: <https://hal.science/hal-03651849/>, свободный. (дата обращения: 26.10.2025).
8. Song S., Wang T., Shen G., Lin Y., Huang J. Wasserstein Generative Regression // arXiv preprint arXiv:2306.15163. 2023. – Режим доступа: <http://arxiv.org/pdf/2306.15163>, свободный. (дата обращения: 26.10.2025).
9. Nguyen K., Nguyen H., Ho N. Fast estimation of Wasserstein distances via regression on sliced Wasserstein distances // arXiv preprint arXiv:2509.20508. 2025. – Режим доступа: <https://arxiv.org/pdf/2509.20508>, свободный. (дата обращения: 26.10.2025).
10. Hug R., Hübner W., Arens M. Introducing Probabilistic Bézier Curves for N-Step Sequence Prediction // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2020. Vol. 34, No. 06. P. 10162-10169.
11. Fan J., Zhang Q., Taghvaei A., Chen Y. Variational Wasserstein gradient flow // arXiv preprint arXiv:2112.02424. 2022. – Режим доступа: <https://arxiv.org/pdf/2112.02424>, свободный. (дата обращения: 26.10.2025).