Комбинаторная теория надёжности обучения по прецедентам

Воронцов Константин Вячеславович

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук
05.13.17 — теоретические основы информатики

Научный консультант — чл.-корр РАН К. В. Рудаков

ВЦ РАН, 22 апреля 2010

Содержание

Задача обучения по прецедентам

Объекты $\mathbb{X} = \{x_1, \ldots, x_L\}$; алгоритмы $A = \{a_1, \ldots, a_D\}$;

$I(a, x) = \big[$алгоритм a ошибается на объекте $x\big]$;

$\vec{a}(\mathbb{X}) = \big(I(a, x_i)\big)_{i=1}^{L}$ — *вектор ошибок* алгоритма $a \in A$;

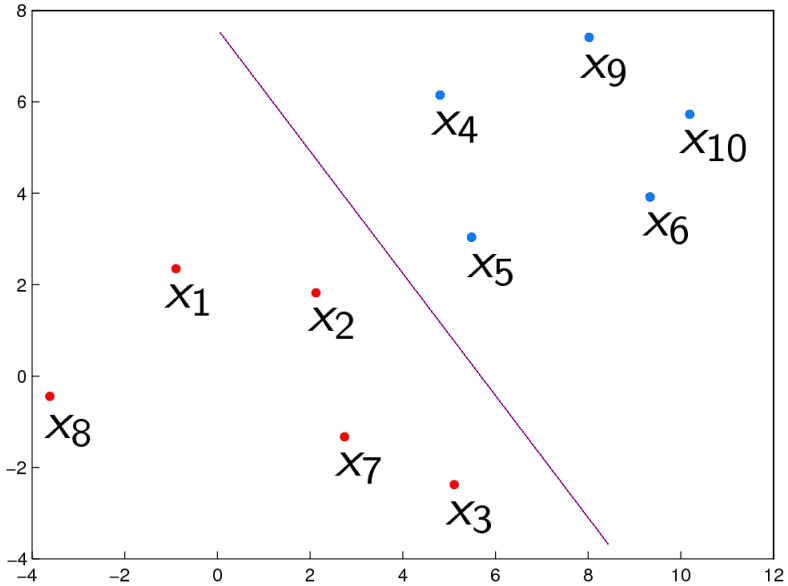
$n(a, X)$ — *число ошибок* алгоритма $a \in A$ на выборке $X \subset \mathbb{X}$;

	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	$\cdots$	a_D	
x_1	1	1	0	0	0	1	$\cdots$	1	X — наблюдаемая
$\ldots$	0	0	0	0	1	1	$\cdots$	1	(обучающая) выборка
x_ℓ	0	0	1	0	0	0	$\cdots$	0	длины ℓ
$x_{\ell+1}$	0	0	0	1	1	1	$\cdots$	0	$\bar{X}$ — скрытая
$\ldots$	0	0	0	1	0	0	$\cdots$	1	(контрольная) выборка
x_L	0	1	1	1	1	1	$\cdots$	0	длины $k = L - \ell$

Задача обучения по прецедентам:

Зная только X, выбрать алгоритм с малым $n(a, \mathbb{X})$.

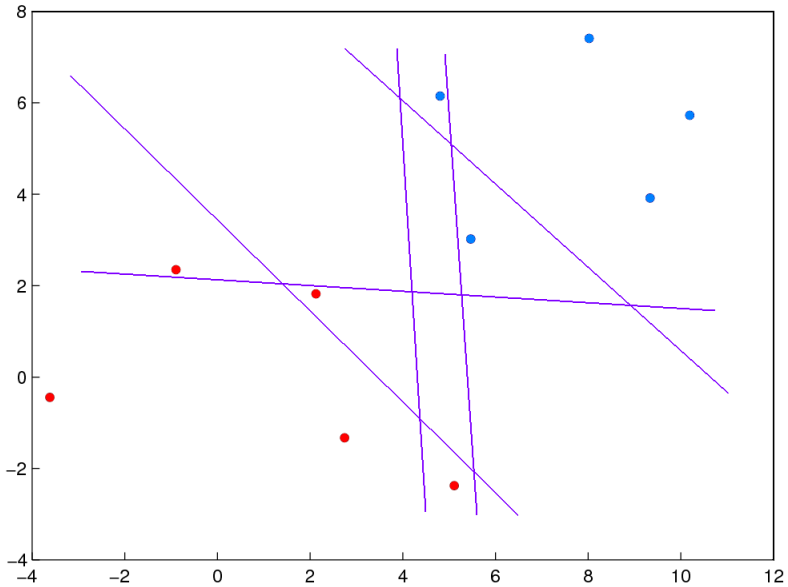
Пример. Матрица ошибок линейных классификаторов



1 вектор с 0 ошибками

x_1	0
x_2	0
x_3	0
x_4	0
x_5	0
x_6	0
x_7	0
x_8	0
x_9	0
x_{10}	0

Пример. Матрица ошибок линейных классификаторов

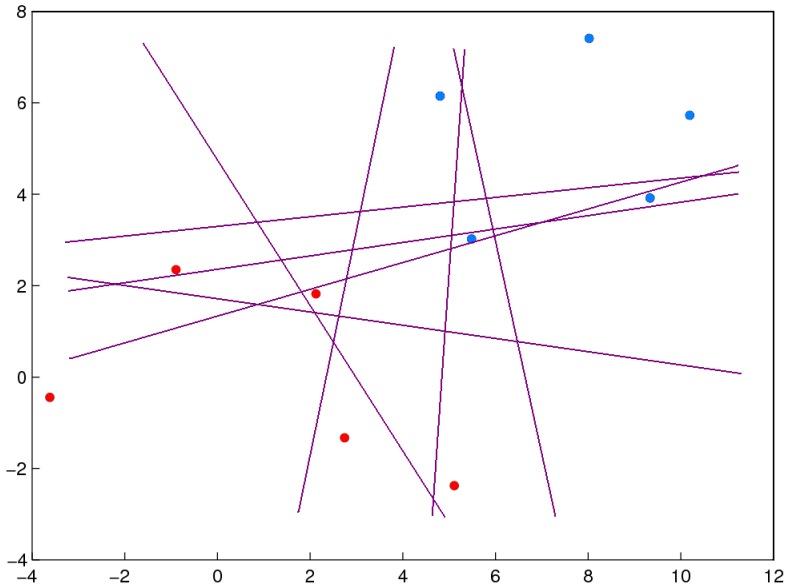


1 вектор с 0 ошибками

5 векторов с 1 ошибкой

x_1	0	1	0	0	0	0
x_2	0	0	1	0	0	0
x_3	0	0	0	1	0	0
x_4	0	0	0	0	1	0
x_5	0	0	0	0	0	1
x_6	0	0	0	0	0	0
x_7	0	0	0	0	0	0
x_8	0	0	0	0	0	0
x_9	0	0	0	0	0	0
x_{10}	0	0	0	0	0	0

Пример. Матрица ошибок линейных классификаторов



1 вектор с 0 ошибками
5 векторов с 1 ошибкой
8 векторов с 2 ошибками
и т. д...

x_1	0	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	1	0	...
x_2	0	0	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	...
x_3	0	0	0	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	1	...
x_4	0	0	0	0	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	...
x_5	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	1	1	0	0	...
x_6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	...
x_7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	...
x_8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	...
x_9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	...
x_{10}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	...

Задача оценивания вероятности переобучения

Допустим, что для решения задачи обучения по прецедентам выбран некоторый *метод обучения* $\mu\colon \mathbb{X}^\ell \to A$.

Пример — метод *минимизации эмпирического риска*:

$$\mu X = \arg\min_{a\in A} n(a, X).$$

Опр. *Переобученность* алгоритма a на разбиении $X \sqcup \bar{X} = \mathbb{X}$:

$$\delta(a, X, \bar{X}) = \tfrac{1}{k} n\big(a, \bar{X}\big) - \tfrac{1}{\ell} n\big(a, X\big).$$

Опр. *Переобучение* — это событие $\big[\delta(\mu X, X, \bar{X}) \geqslant \varepsilon\big]$.

Задача — оценить *вероятность переобучения*:

$$Q_\varepsilon(\mu, \mathbb{X}) = \mathsf{P}_{X,\bar{X}}\big[\delta(\mu X, X, \bar{X}) \geqslant \varepsilon\big] \leqslant \eta(\varepsilon) \ \ - ?$$

Теория Вапника-Червоненкиса

Равномерная оценка по всему множеству алгоритмов A:

$$Q_\varepsilon(\mu, \mathbb{X}) = \mathsf{P}\big[\delta(\mu X, X, \bar{X}) \geqslant \varepsilon\big] \leqslant \mathsf{P}\Big[\max_{a \in A} \delta(a, X, \bar{X}) \geqslant \varepsilon\Big]$$

Теорема (Вапник и Червоненкис, 1971)

Для любых P, A, μ *и* $\varepsilon \in (0,1)$, *при* $\ell = k$

$$\mathsf{P}\Big[\max_{a \in A} \delta(a, X, \bar{X}) \geqslant \varepsilon\Big] \leqslant |A| \cdot e^{-\varepsilon^2 \ell}$$

Проблема: сильная завышенность оценки приводит к

- требованию сокращения $|A|$ и переупрощению алгоритмов;
- требованию избыточного увеличения ℓ.

Проблема сильной завышенности VC-оценки

Требуемая длина обучающей выборки при заданных точности ε, надёжности $\eta = 0.01$ и ёмкости $h = \mathrm{VCdim}(A)$

h	$\varepsilon = 0.01$	$\varepsilon = 0.05$	$\varepsilon = 0.1$	$\varepsilon = 0.2$
0	35900	1440	360	91
2	259300	7619	1600	316
5	632633	18260	3770	741
10	1262928	36396	7521	1470
20	2531001	72918	15069	2936
50	6348132	182980	37821	7381
100	7373100	295440	73821	14811

Вывод

На практике достаточно на порядки меньшего числа объектов.

Развитие VC-теории, 1968–2009

- Оценки равномерной сходимости [Вапник, Червоненкис, 1968]
- Theory of learnable (PAC-learning) [Valiant, 1982]
- Data-dependent bounds [Haussler, 1992]
- Concentration inequalities [Talagrand, 1995]
- Connected function classes [Sill, 1995]
- Similar classifiers VC bounds [Bax, 1997]
- Margin based bounds [Bartlett, 1998]
- Self-bounding learning algorithms [Freund, 1998]
- Rademacher complexity [Koltchinskii, 1998]
- Adaptive microchoice bounds [Langford, Blum, 2001]
- Algorithmic stability [Bousquet, Elisseeff, 2002]
- Algorithmic luckiness [Herbrich, Williamson, 2002]
- Shell bounds [Langford, 2002]
- PAC-Bayes bounds [McAllester, 1999; Langford, 2005]

Причины завышенности VC-оценок

Основная причина — чрезмерная общность

VC-оценка зависит только от размеров $L \times D$ матрицы ошибок, но не зависит от значений в матрице.

VC-оценка не учитывает:

- свойства конкретной выборки $\mathbb{X}$.
- свойства конкретного метода обучения μ.

VC-оценка — это оценка «худшего случая».

Ни одна из известных теорий

- не устраняет *всех* причин завышенности;
- не даёт *точных* оценок Q_ε.

Цели и методика исследования

Цель диссертационной работы

Создание нового математического аппарата для получения точных оценок вероятности переобучения.

Основные этапы исследования

1. Введение слабой вероятностной аксиоматики.
2. Экспериментальное измерение факторов завышенности и понимание причин завышенности VC-оценок.
3. Исследование модельных частных случаев.
4. Разработка общих методов получения точных оценок.
5. Применение — создание новых методов обучения.

Недостатки классического вероятностного подхода

Вероятность большого отклонения частоты ν от вероятности P:

$$P_\varepsilon = \mathsf{P}_X\{|\nu(X) - P| > \varepsilon\}.$$

Недостатки

- Невозможно измерить вероятность P_ε как частоту, если вероятность P неизвестна.
- Невозможно получить точное выражение для P_ε; оценки P_ε либо завышенные, либо асимптотические.

Причина недостатков — вероятность P *инфинитарна*.
Но бесконечных выборок в задачах анализа данных не бывает!

Предлагается оценивать частоту $\nu(\bar{X})$ на скрытой выборке $\bar{X}$:

$$Q_\varepsilon = \mathsf{P}_{X,\bar{X}}\{|\nu(X) - \nu(\bar{X})| > \varepsilon\}.$$

Слабая вероятностная аксиоматика: основная аксиома

Пусть $\mathbb{X} = \{x_1, \ldots, x_L\}$ — конечное множество объектов.

Аксиома (единственное вероятностное допущение)

Все C_L^ℓ разбиений $X \sqcup \bar{X} = \mathbb{X}$ равновероятны, где
X *— наблюдаемая обучающая выборка длины* $\ell = |X|$;
$\bar{X}$ *— скрытая контрольная выборка длины* $k = |\bar{X}| = L - \ell$;

Теория меры и предельный переход $L \to \infty$ не используются.
Вероятность понимается только как *доля разбиений выборки*:

$$Q_\varepsilon(\mu, \mathbb{X}) = \mathsf{P}\big[\delta(\mu, X, \bar{X}) \geqslant \varepsilon\big] = \frac{1}{C_L^\ell} \sum_{\substack{X, \bar{X} \\ X \sqcup \bar{X} = \mathbb{X}}} \big[\delta(\mu, X, \bar{X}) \geqslant \varepsilon\big].$$

Это аналог стандартной гипотезы о *независимости* наблюдений.

Аналог закона больших чисел в слабой аксиоматике

Пусть $|A| = 1$, $\mu X = a$ для всех $X \subset \mathbb{X}$.
Обозначим $m = n(a, \mathbb{X})$, $s = n(a, X)$.

Теорема (точная оценка)

Вероятность большого уклонения частот описывается функцией гипергеометрического распределения (ГГР):

$$Q_\varepsilon(a, \mathbb{X}) = H_L^{\ell,m}\left(\tfrac{\ell}{L}(m - \varepsilon k)\right),$$

где $H_L^{\ell,m}(z) = \sum_{s=0}^{\lfloor z \rfloor} \frac{C_m^s C_{L-m}^{\ell-s}}{C_L^\ell}$ *— левый «хвост» ГГР.*

Вывод: основная аксиома обеспечивает возможность предсказания скрытого $n(a, \bar{X})$ по наблюдаемому $n(a, X)$.

В слабой аксиоматике также передоказаны:

- сходимость эмпирических распределений (критерий Смирнова, в том числе для дискретных распределений);
- доверительные интервалы для квантилей;
- критерий знаков, Уилкоксона–Манна–Уитни, и другие непараметрические критерии;
- оценки Вапника–Червоненкиса;

Открытая проблема

Насколько значительную часть теории вероятностей, математической статистики, теории информации возможно переформулировать в рамках слабой аксиоматики?

Обобщение оценки Вапника–Червоненкиса

Определение

Степень некорректности метода обучения μ на выборке $\mathbb{X}$:

$$\sigma(\mu, \mathbb{X}) = \max_{X \subset \mathbb{X}:\, |X|=\ell} \nu(\mu X, X).$$

Теорема

Для любых $\mathbb{X}$, A, μ, $\sigma(\mu, \mathbb{X}) \leqslant \sigma$, $\varepsilon \in (0,1)$

$$Q_\varepsilon(\mu, \mathbb{X}) \leqslant |A| \max_{m \in M(\varepsilon,\sigma)} H_L^{\ell,m}\left(s(\varepsilon,\sigma)\right),$$

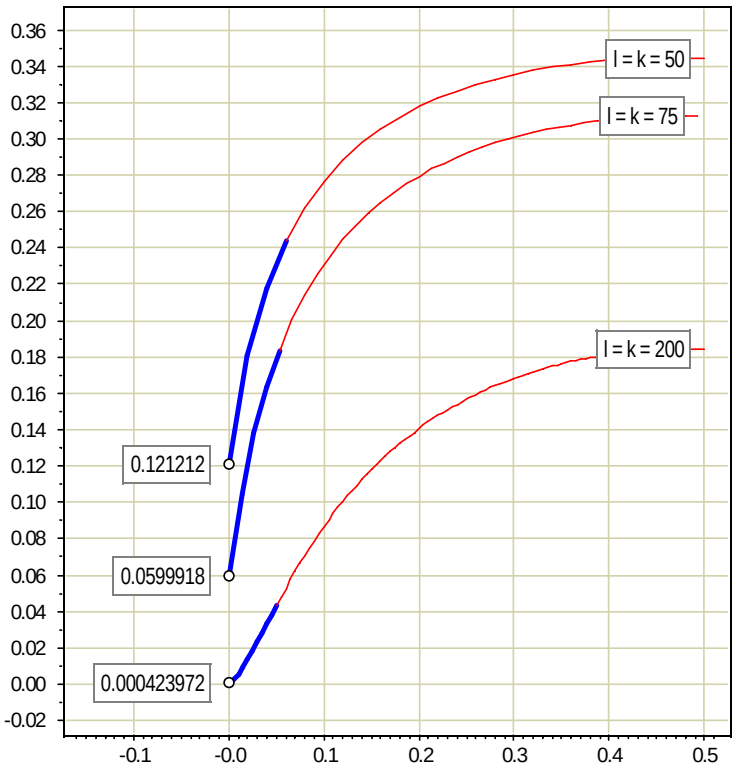
где

$$M(\varepsilon,\sigma) = \{m\colon \varepsilon k \leqslant m \leqslant k + \sigma\ell\};$$

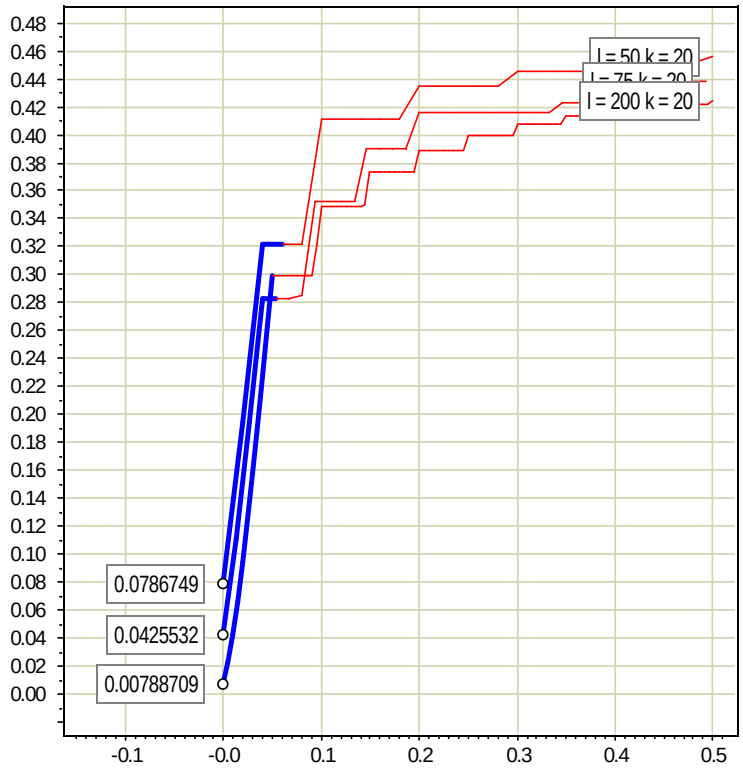
$$s(\varepsilon,\sigma) = \min\left\{\tfrac{\ell}{L}(m - \varepsilon k), \sigma\ell\right\}.$$

Обобщение оценки Вапника–Червоненкиса (эксперимент)

Зависимость Q_ε от степени некорректности σ при $|A| = 1$:



при $\ell = k = 50, 75, 200$.



при $\ell = 50, 75, 200$; $k = 20$.

Обобщение оценки Вапника–Червоненкиса (выводы)

Выводы

- Даже малая некорректность приводит к резкому увеличению вероятности переобучения Q_ε.
- Учёт корректности в некоторых случаях уменьшает VC-оценку в сотни раз.
- Однако схема доказательства остаётся та же, ни одна из причин завышенности VC-оценки не устраняется.

Задачи следующего этапа

- Измерить факторы завышенности количественно в эксперименте на реальных данных.
- Выделить наиболее значимые факторы завышенности.

Идея эмпирического измерения факторов завышенности

В слабой аксиоматике вероятность измеряется по случайному подмножеству разбиений $X_n \sqcup \bar{X}_n = \mathbb{X}$, $n = 1, \ldots, N$:

$$\hat{Q}_\varepsilon(\mu, \mathbb{X}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \left[\delta(\mu X_n, X_n, \bar{X}_n) \geqslant \varepsilon \right]$$

Степень завышенности раскладывается в произведение факторов:

$$\hat{Q}_\varepsilon(\mu, \mathbb{X}) \cdot r_1 \cdot r_2 \cdot r_3 \cdot r_4 = |A| \cdot e^{-\varepsilon^2 \ell}$$

Факторы завышенности VC-оценки:

- $r_1 \geqslant 1$: расслоение (принцип равномерной сходимости)
- $r_2 \geqslant 1$: сходство (применение неравенства Буля)
- $r_3 \geqslant 1$: оценка профиля разнообразия сверху константой
- $r_4 \geqslant 1$: экспоненциальная аппроксимация ГГР

Вычислительный эксперимент

- 7 задач классификации на два класса (из репозитория UCI)
- 20×2-кратный скользящий контроль, $\ell = k$
- Логический алгоритм классификации Forecsys LogicPro® [Воронцов, Кочедыков, Ивахненко]

Задача	L	n	средняя ошибка не тестовых данных				
			C4.5	C5.0	RIPPER	SLIPPER	LogicPro
crx	690	15	15.5	14.0	15.2	15.7	14.3 ± 0.2
german	1000	20	27.0	28.3	28.7	27.2	28.5 ± 1.0
hepatitis	155	19	18.8	20.1	23.2	17.4	16.7 ± 1.7
horse-colic	300	25	16.0	15.3	16.3	15.0	16.4 ± 0.5
hypothyroid	3163	25	0.4	0.4	0.9	0.7	0.8 ± 0.04
liver	345	6	37.5	31.9	31.3	32.2	29.2 ± 1.6
promoters	106	57	18.1	22.7	19.0	18.9	12.0 ± 2.0

L — объём полной выборки; n — число признаков.

Результаты эксперимента

Причины завышенности VC-оценок

(пороги $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2$ соответствуют надёжности $\hat{Q}_\varepsilon = 0.05,\ 0.1,\ 0.01$).

Задача	y	r_1	$r_2(\varepsilon_0)$	$r_3(\varepsilon_0)$	$r_4(\varepsilon_0)$	$\Delta[\varepsilon_1, \varepsilon_2]$	$\Delta(\varepsilon_0)$
crx	0	890	680	3.1	32.6	[10; 41]	24
	1	690	1700	1.6	11.6	[11; 180]	12
german	1	8 950	1500	1.7	10.9	[38; 530]	54
	2	37 000	9000	1.2	9.9	[1.0; 2.2]	1.9
hepatitis	0	23	280	13.4	9.5	[11; 148]	83
	1	55	680	2.4	22.5	[12; 27]	15
horse-colic	1	72	4500	2.1	7.2	[2; 9]	7
	2	140	3400	3.6	7.3	[3; 6]	6
hypothyroid	0	61 000	400	32.2	16.5	[3; 220]	21
	1	153 000	460	3.8	28.7	[2; 44]	30
promoters	0	94	340	5.9	9.8	[36; 230]	72
	1	150	790	3.4	6.9	[9; 22]	18

Выводы

Результаты экспериментов на 7 реальных задачах из UCI:

$|A| \sim 10^6 \ldots 10^{11}$ — число алгоритмов в A;

$\Delta \sim 10^0 \ldots 10^2$ — число эффективно используемых алгоритмов (эффективный локальный коэффициент разнообразия, ЭЛКР).

Основные причины завышенности

- Не учитывается *расслоение* множества алгоритмов:
  чем выше $m = n(a, \mathbb{X})$, тем меньше $\mathsf{P}[\mu X = a]$
  (завышенность в $r_1 = 10^2 \ldots 10^5$ раз);
- Не учитывается *связность* множества алгоритмов:
  чем больше схожих алгоритмов, тем сильнее завышенность
  (завышенность в $r_2 = 10^3 \ldots 10^4$ раз).

На практике множество A, как правило, расслоено и связно.

Связные семейства и цепочки алгоритмов

Опр. 1. Семейство A *связное*, если $\forall a{\in}A\ \ \exists a'{\in}A$: $\rho(a,a')=1$.

$\rho(a,a')$ — хэммингово расстояние между векторами ошибок:

$$\rho(a,a')=\sum_{i=1}^{L}\left|I(a,x_i)-I(a',x_i)\right|,\quad \forall a,a'\in A.$$

Опр. 2. *Цепочка алгоритмов* — последовательность $a_0,a_1,\ldots,a_D$ такая, что $\rho(a_{d-1},a_d)=1$ для всех $d=1,\ldots,D$.

Опр. 3. Цепочка алгоритмов *монотонная*, если $I(a_{d-1},x)\leqslant I(a_d,x)$ для всех $x\in\mathbb{X}$ и $d=1,\ldots,D$.

Пример:

	a_0	a_1	a_2	a_3	$\cdots$	a_D
x_1	0	1	1	1	1	1
x_2	0	0	1	1	1	1
x_3	0	0	0	1	1	1
$\cdots$	0	0	0	0	1	1
x_L	0	0	0	0	0	1

Эксперимент с монотонной цепочкой алгоритмов

Цель эксперимента: понять, как *связность* и *расслоение* влияют на вероятность переобучения.

Цепочка с расслоением:

	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
x_1	1	1	1	1	1	1	1
x_2	0	$\to$ 1	1	1	1	1	1
x_3	0	0	$\to$ 1	1	1	1	1
x_4	0	0	0	$\to$ 1	1	1	1
x_5	0	0	0	0	$\to$ 1	1	1
x_6	0	0	0	0	0	$\to$ 1	1

Цепочка без расслоения:

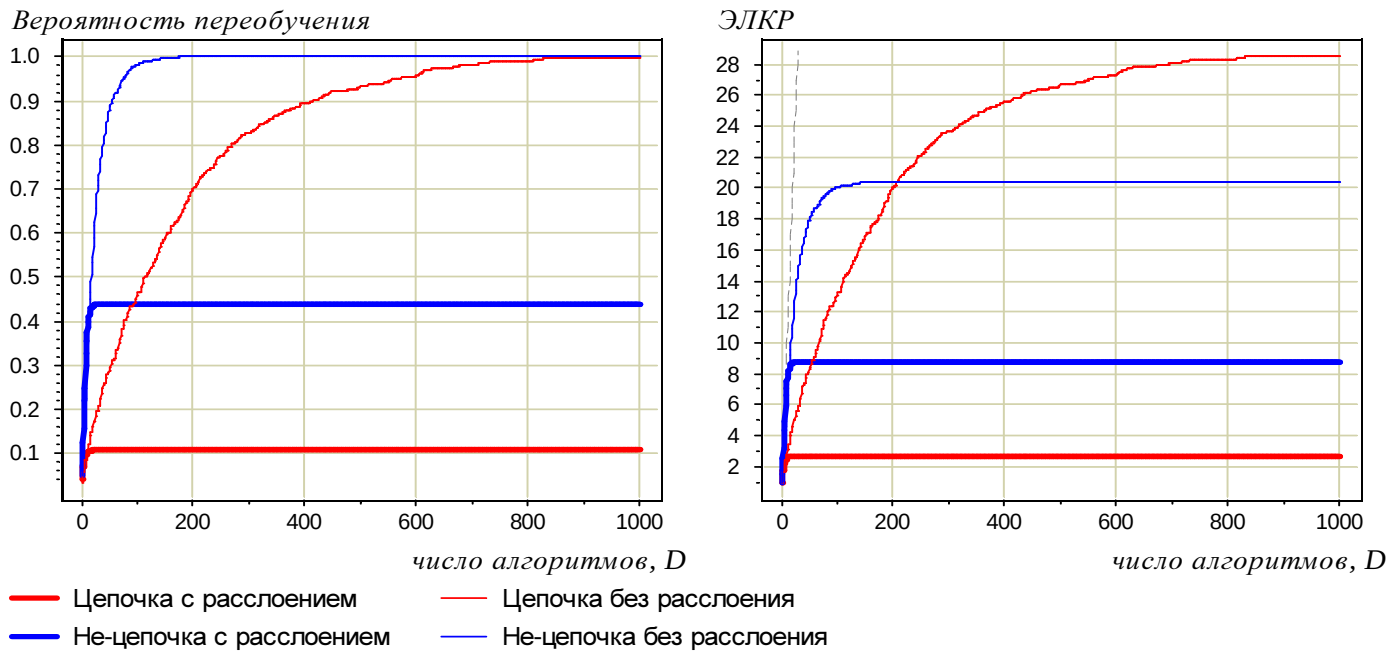
	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
x_1	1	1	$\to$ 0	0	0	0	0
x_2	0	$\to$ 1	1	1	$\to$ 0	0	0
x_3	0	0	0	$\to$ 1	1	1	$\to$ 0
x_4	0	0	0	0	0	$\to$ 1	1
x_5	0	0	0	0	0	0	0
x_6	0	0	0	0	0	0	0

Для каждой цепочки генерируется *не-цепочка* путём случайной перестановки единиц в каждом столбце.

Итого имеем 4 модельных семейства.

Цепочки и не-цепочки; с расслоением и без

Зависимость Q_ε от D при $\ell = k = 100$, $\varepsilon = 0.05$, $n(a_0, \mathbb{X}) = 10$.



Выводы

- *Связность* приводит к замедлению роста $Q_\varepsilon(D)$.
- *Расслоение* понижает уровень горизонтальной асимптоты.

Эксперимент с монотонной цепочкой алгоритмов

Основные выводы

- Без расслоения или связности переобучение ($Q_\varepsilon = \frac{1}{2}$) наступает уже при $|A|$ порядка $20, \ldots, 100$.
- На практике «хорошие» семейства обязаны быть расслоенными и обладать той или иной структурой сходства алгоритмов, например, связностью.
- Дальнейшая цель — изучение структур расслоения и сходства (связности) в семействах алгоритмов.

«Игрушечный пример»: двухэлементное множество алгоритмов

Пусть алгоритмы a_1, a_2 допускают m_1, m_2 ошибок на X^L:

$$a_1 = (\overbrace{1\,1\,1\;1\,1\,1\,1\,1}^{m_1}\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0);$$
$$a_2 = (0\,0\,0\,\overbrace{1\,1\,1\,1\,1\;1\,1\,1\,1\,1}^{m_2}\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0).$$

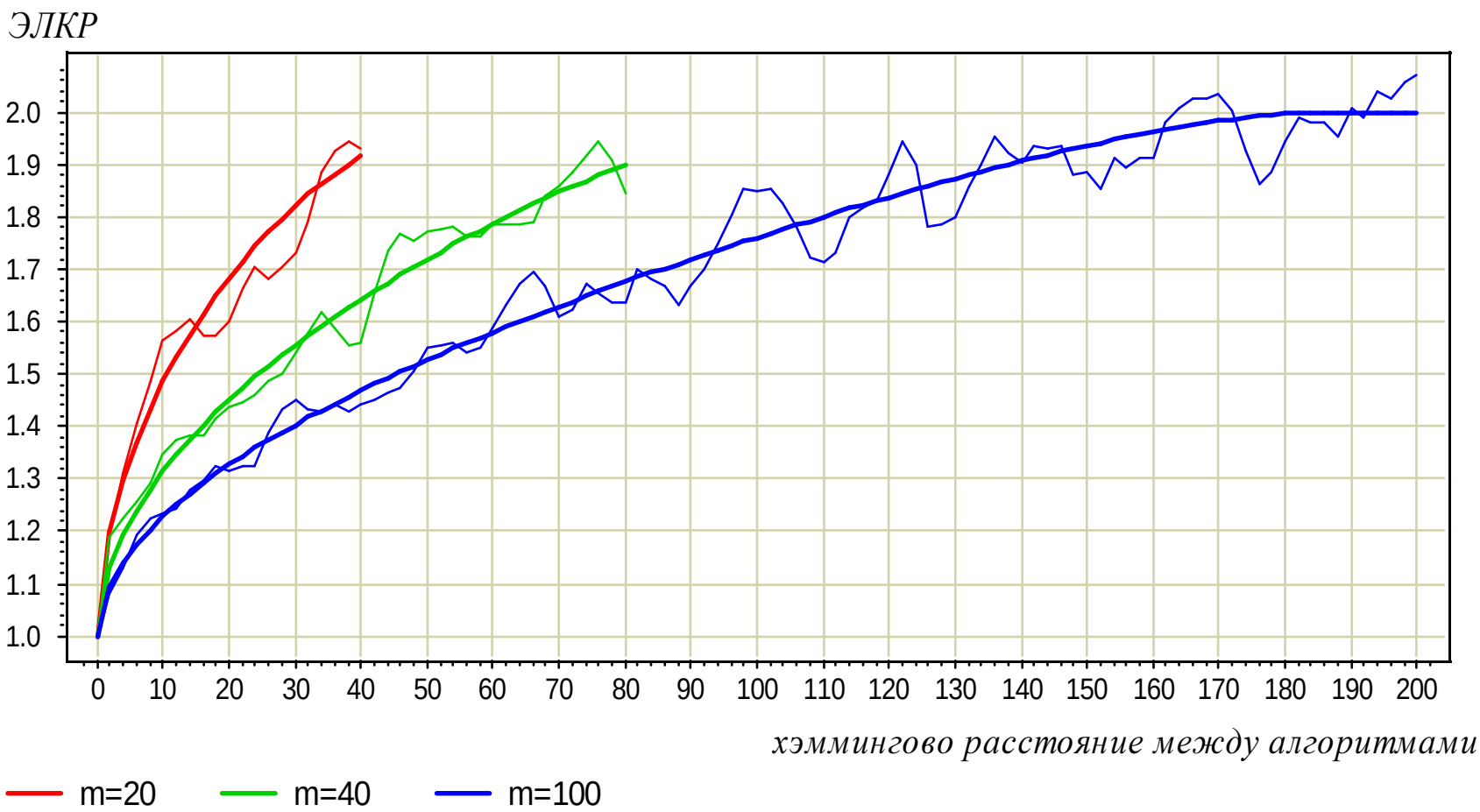
m_0

Теорема (точная оценка вероятности переобучения)

$$Q_\varepsilon = \sum_{s_0=0}^{m_0}\sum_{s_1=0}^{m_1}\sum_{s_2=0}^{m_2} \frac{C_{m_0}^{s_0} C_{m_1}^{s_1} C_{m_2}^{s_2} C_{L-m_0-m_1-m_2}^{\ell-s_0-s_1-s_2}}{C_L^\ell} \times$$
$$\times\Big(\big[s_1 < s_2\big]\big[s_0+s_1 \leqslant \tfrac{\ell}{L}(m_0+m_1-\varepsilon k)\big] + $$
$$+ \big[s_1 \geqslant s_2\big]\big[s_0+s_2 \leqslant \tfrac{\ell}{L}(m_0+m_2-\varepsilon k)\big]\Big).$$

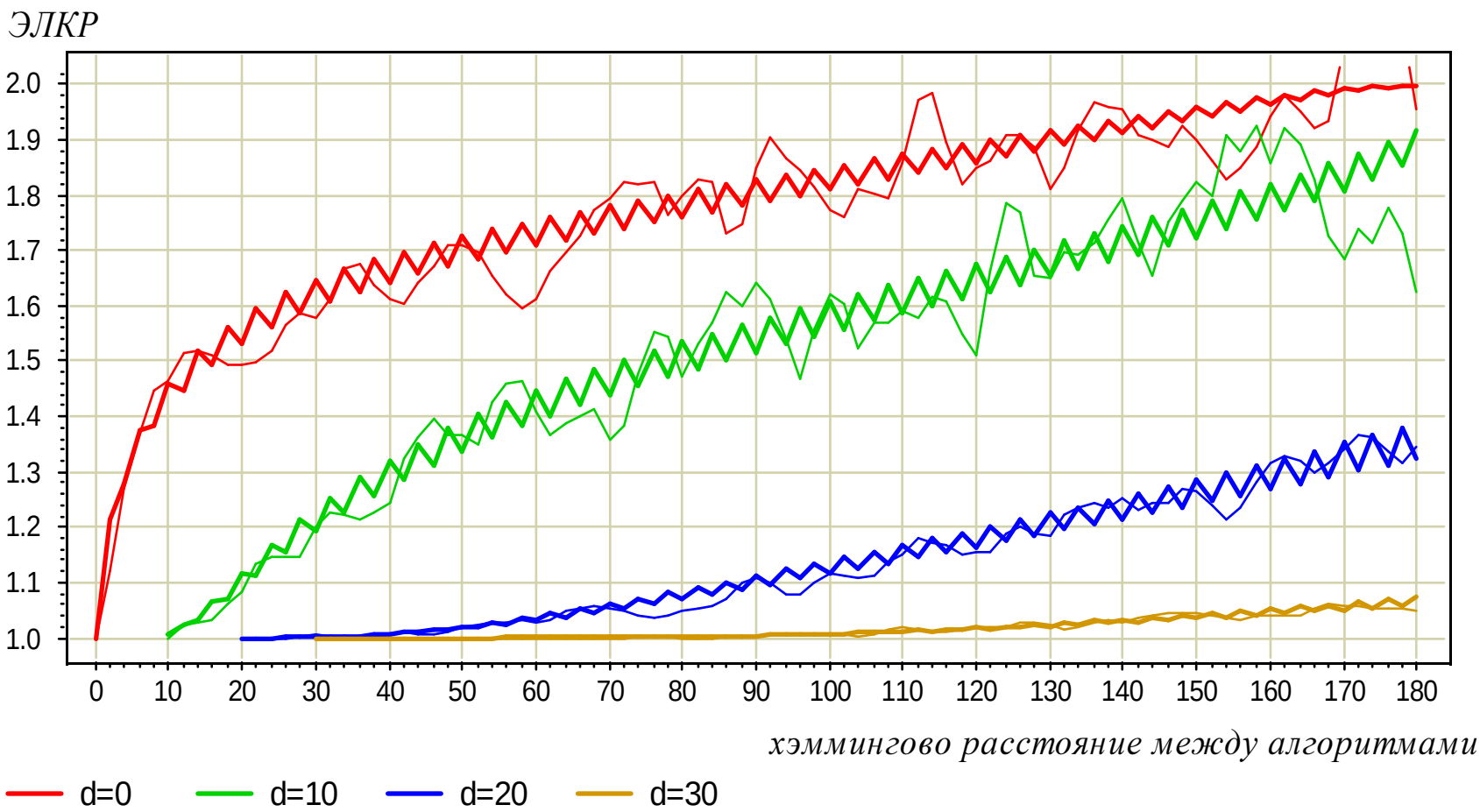
Эксперимент №1. Два алгоритма одинакового качества

$\ell = k = 100$; $\varepsilon = 0.05$; $m_1 = m_2$; $m = 20, 40, 100$



Эксперимент №2. Два алгоритма разного качества (расслоение)

$\ell = k = 100;\ \varepsilon = 0.05;\ m_0 = 20;\ d \equiv m_2 - m_1 = 0, 10, 20, 30$



Двухэлементное множество алгоритмов

Выводы

- Переобучение имеет место всегда, когда выбор решения производится по неполной информации — даже в простейшем случае, когда вариантов выбора только два.
- И уже в этом случае эффекты расслоения и сходства проявляются и снижают вероятность переобучения.

Задача следующего этапа

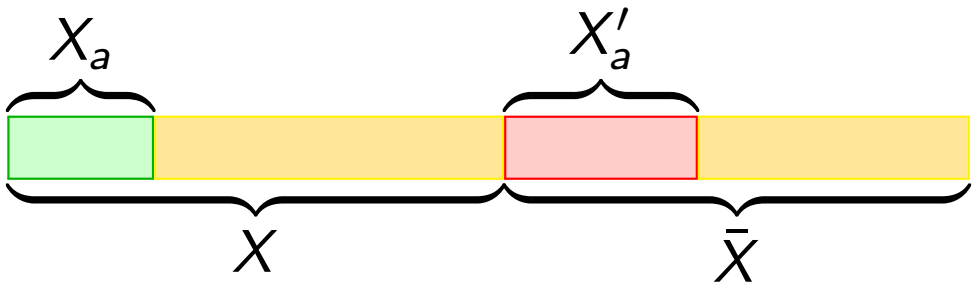
Развить математические методы получения точных оценок Q_ε для множеств алгоритмов с расслоением и связностью.

Гипотеза о порождающих и запрещающих объектах

Гипотеза (1)

Для каждого $a \in A$ можно указать пару непересекающихся подмножеств объектов $X_a \subset \mathbb{X}$, $X'_a \subset \mathbb{X}$ такую, что:

$$\big(\mu X{=}a\big) \;\Leftrightarrow\; \big(X_a \subseteq X\big) \text{ и } \big(X'_a \subseteq \bar{X}\big), \quad \forall X \subset \mathbb{X}.$$



Опр. X_a — множество объектов, *порождающих* алгоритм a.

Опр. X'_a — множество объектов, *запрещающих* алгоритм a.

Опр. $\mathbb{X}\backslash(X_a \cup X'_a)$ — множество объектов, *нейтральных* для a.

Обозначения и основная лемма

Введём для каждого $a \in A$ следующие обозначения:

$L_a = L - |X_a| - |X'_a|$ — число нейтральных объектов;
$\ell_a = \ell - |X_a|$ — число нейтральных обучающих объектов;

Лемма (о вероятности получения алгоритма)

Если гипотеза (1) справедлива, то вероятность получить в результате обучения алгоритм a равна доле разбиений, при которых объекты из X_a и X'_a остаются на своих местах:

$$P_a = \mathsf{P}\big[\mu X{=}a\big] = \frac{C_{L_a}^{\ell_a}}{C_L^{\ell}}.$$

Ещё обозначения и основная теорема

$m_a = n(a, \mathbb{X}) - n(a, X_a) - n(a, X'_a)$
— число ошибок алгоритма a на нейтральных объектах;

$s_a(\varepsilon) = \frac{\ell}{L}\big(n(a, \mathbb{X}) - \varepsilon k\big) - n(a, X_a)$
— наибольшее число ошибок переобученного алгоритма a на нейтральных обучающих объектах $X \setminus X_a$.

Теорема (точная оценка вероятности переобучения)

Если гипотеза (1) справедлива, то

$$\mathsf{P}\big[\delta_\mu(X) \geqslant \varepsilon\big] = \sum_{a \in A} P_a H_{L_a}^{\ell_a, m_a}\left(s_a(\varepsilon)\right).$$

Обобщение основной гипотезы

Гипотеза (2)

Для каждого $a \in A$ можно указать такой набор пар непересекающихся подмножеств объектов $X_{av}, X'_{av} \subset \mathbb{X}$, $v \in V_a$ и такой коэффициент $c_{av} \in \mathbb{R}$, что

$$[\mu X{=}a] = \sum_{v \in V_a} c_{av} [X_{av} \subseteq X] [X'_{av} \subseteq \bar{X}].$$

Обозначения: для каждого $a \in A$ и каждого $v \in V_a$

$$L_{av} = L - |X_{av}| - |X'_{av}|;$$
$$\ell_{av} = \ell - |X_{av}|;$$
$$m_{av} = n(a, \mathbb{X}) - n(a, X_{av}) - n(a, X'_{av});$$
$$s_{av}(\varepsilon) = \tfrac{\ell}{L}\big(n(a, \mathbb{X}) - \varepsilon k\big) - n(a, X_{av}).$$

Обобщение: лемма и основная теорема

Лемма (о вероятностях получения алгоритмов)

Если гипотеза (2) справедлива, то вероятность получить в результате обучения алгоритм с вектором ошибок a

$$\mathsf{P}\big[\mu X{=}a\big] = \sum_{v \in V_a} c_{av} P_{av}; \qquad P_{av} = \frac{C_{L_{av}}^{\ell_{av}}}{C_L^{\ell}}.$$

Теорема (точная оценка вероятности переобучения)

Если гипотеза (2) справедлива, то

$$Q_\varepsilon = \sum_{a \in A} \sum_{v \in V_a} c_{av} P_{av} H_{L_{av}}^{\ell_{av}, m_{av}} \left(s_{av}(\varepsilon)\right).$$

Сильное ли ограничение накладывает гипотеза (2)?

Оказывается, почти не накладывает. Это общий случай!

Теорема

Пусть векторы ошибок алгоритмов $a_1, \ldots, a_D$ попарно различны и метод μ минимизирует эмпирический риск.

Тогда справедлива гипотеза (2), причём $c_{av} = 1$.

Доказательство конструктивно, но «тавтологично» — строится *система подмножеств* $(X_{av}, X'_{av})_{v \in V_a} \equiv (X, \bar{X})_{\mu X = a}$, что приводит к вычислительно неэффективным оценкам.

В общем случае система подмножеств не единственна.

Открытая проблема

Как искать системы подмножеств с наименьшими $|X_{av}|$, $|X'_{av}|$?

Монотонная цепочка алгоритмов

Чем интересна *монотонная цепочка:*

- это простейший пример связного семейства с расслоением;
- это модель «хорошего» однопараметрического семейства.

	a_0	a_1	a_2	a_3	$\cdots$	a_D
x_1	0	1	1	1	1	1
x_2	0	0	1	1	1	1
x_3	0	0	0	1	1	1
x_4	0	0	0	0	1	1
$\cdots$	0	0	0	0	0	1
$\cdots$	0	0	0	0	0	0
$\cdots$	0	0	0	0	0	0
$\cdots$	1	1	1	1	1	1
x_L	1	1	1	1	1	1

Вероятность переобучения монотонной цепочки

Пусть μ — *пессимистичная минимизация эмпирического риска* (выбор алгоритма по принципу «худший из лучших»):

$$A(X) = \operatorname{Arg}\min_{a\in A} n(a, X); \quad \mu X = \arg\max_{a\in A(X)} n(a, \bar{X}).$$

Теорема (точная оценка вероятности переобучения)

Пусть $a_0, a_1, \ldots, a_D$ — *монотонная цепочка,* $n(a_0, \mathbb{X}) = m$, $k \leqslant D \leqslant L - m$. *Тогда*

$$P_d = \mathsf{P}\left[\mu X = a_d\right] = \frac{C_{L-d-1}^{\ell-1}}{C_L^\ell};$$

$$Q_\varepsilon(\mu, \mathbb{X}) = \sum_{d=0}^{k} P_d H_{L-d-1}^{\ell-1,m}\left(\tfrac{\ell}{L}(m + d - \varepsilon k)\right).$$

Идея доказательства

Перенумеруем объекты так, чтобы a_d ошибался на $x_1, \ldots, x_d$.

	a_0	a_1	a_2	a_3	$\cdots$	a_D
x_1	0	1	1	1	1	1
x_2	0	0	1	1	1	1
x_3	0	0	0	1	1	1
x_4	0	0	0	0	1	1
$\cdots$	0	0	0	0	0	1
$\cdots$	0	0	0	0	0	0
$\cdots$	0	0	0	0	0	0
$\cdots$	1	1	1	1	1	1
x_L	1	1	1	1	1	1

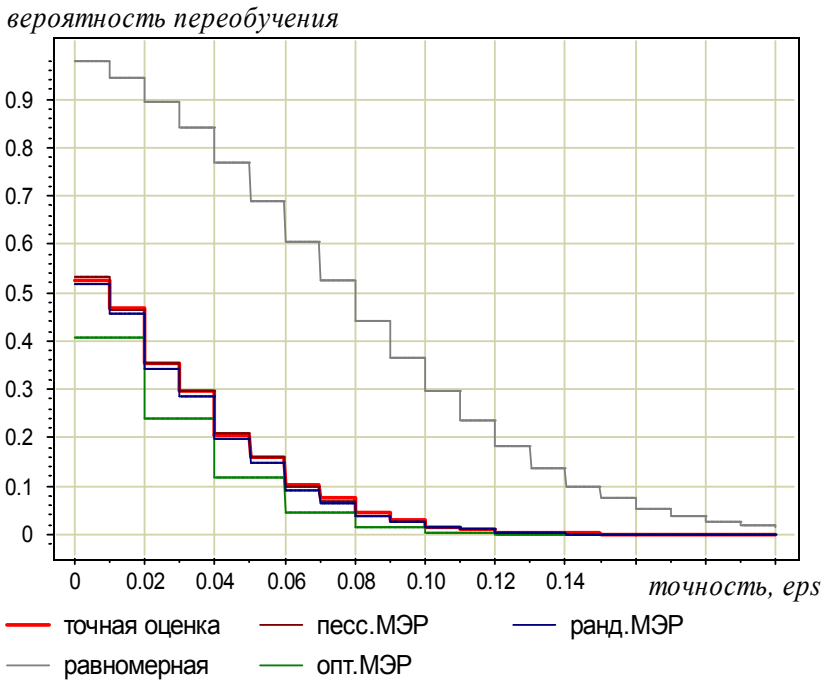
$(\mu X{=}a_d) \quad \Leftrightarrow \quad (x_{d+1} \in X)$ и $(x_1, \ldots, x_d \in \bar{X})$, при $d \leqslant k$;

$(\mu X{=}a_d)$ невозможно, при $d > k$.

Таким образом, справедлива Гипотеза (1).

Вычислительный эксперимент

Зависимость Q_ε от точности ε при $\ell = k = 100$, $m = 20$:

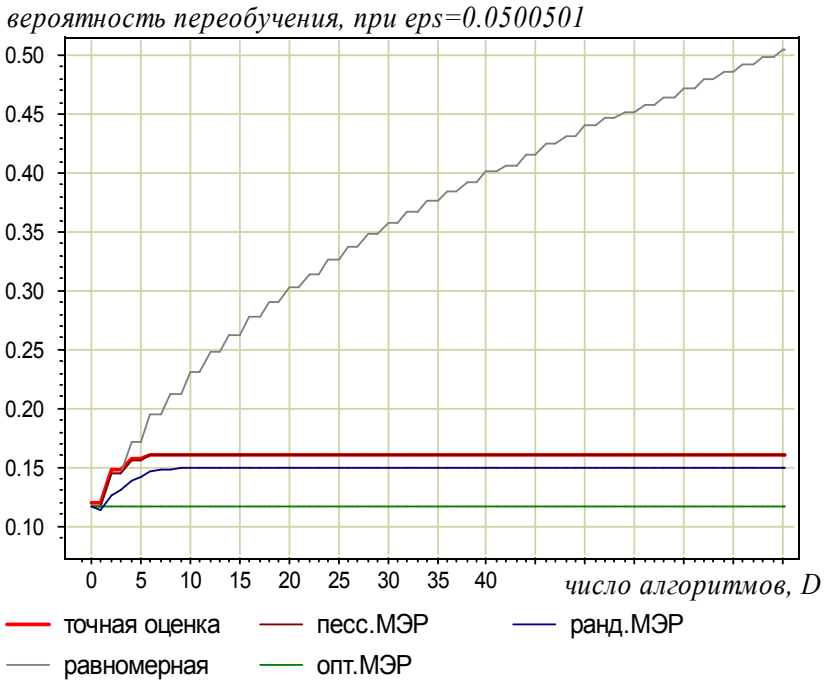


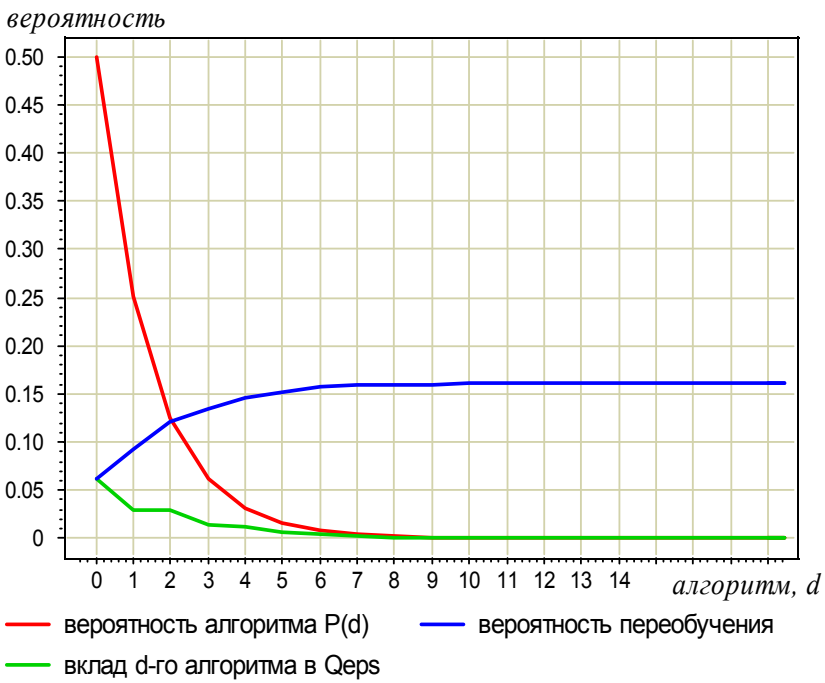
Вывод

- Равномерная оценка сильно завышена при больших ε.

Вычислительный эксперимент

Зависимость Q_ε от D при $\ell = k = 100$, $m = 20$, $\varepsilon = 0.05$:





Выводы

- Монотонная цепочка почти не переобучается.
- Существенны вклады только 5–6 нижних слоёв.

Другие модельные семейства алгоритмов,

для которых в данной работе получены точные оценки:

- унимодальная цепочка алгоритмов;
- единичная окрестность лучшего алгоритма;
- слой булева куба;
- интервал булева куба;
- d нижних слоёв интервала булева куба;

Оценки, полученные другими авторами:

- связные семейства [Д. Кочедыков, И. Решетняк].
- монотонные и унимодальные h-мерные сетки [П. Ботов];
- симметричные семейства алгоритмов [А. Фрей];
- связка монотонных цепочек [А. Фрей];
- хэммингов шар, слои хэммингова шара [И. Толстихин];

Слой булева куба

Пусть $A = \{a\colon n(a, \mathbb{X}) = m\}$ — m-й слой булева куба, $|A| = C_L^m$.

Теорема

Пусть μ — метод минимизации эмпирического риска.
Тогда для любого $\varepsilon \in [0, 1]$

$$Q_\varepsilon = \left[\varepsilon k \leqslant m \leqslant L - \varepsilon\ell\right].$$

Выводы

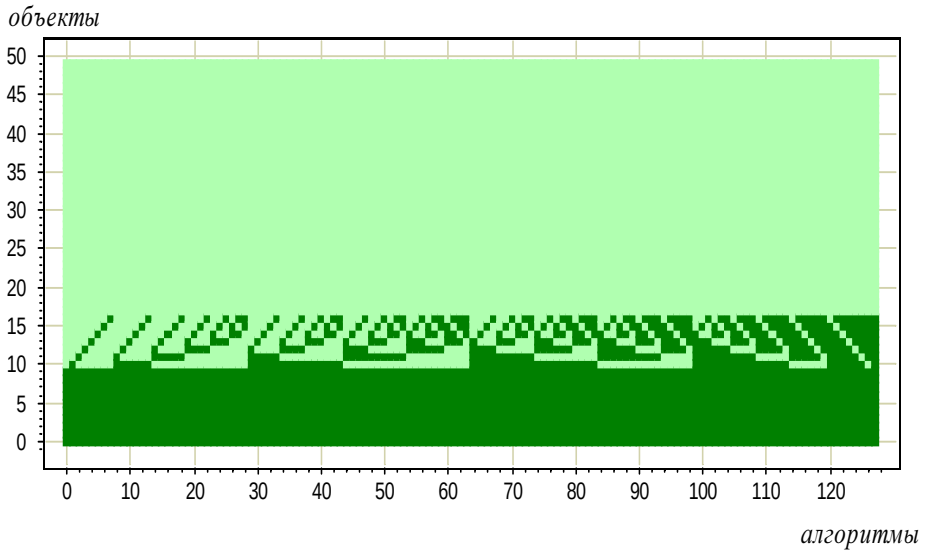
- Алгоритмы нижних слоёв, $m < \varepsilon k$, не вносят вклад в переобучение.
- Нижний слой множества алгоритмов не должен быть «слишком богатым», т. е. полным слоем.

Интервал булева куба

Пусть A — интервал ранга m в L-мерном булевом кубе.

m_0 «внутренних» объектов x_i : $I(a, x) = 0$, $\forall a \in A$;
m_1 «шумовых» объектов x_i : $I(a, x) = 1$, $\forall a \in A$;
m «пограничных» объектов: реализуются все 2^m векторов ошибок.

Пример. Матрица ошибок интервала булева куба при $L = 50$, $m = 7$, $m_0 = 33$, $m_1 = 10$.



Слои интервала булева куба

Теорема

Пусть μ — пессимистичная минимизация эмпирического риска, A — нижние t слоёв интервала ранга m, число шумовых объектов равно m_1. Тогда для любого $\varepsilon \in [0,1]$

$$Q_\varepsilon = \sum_{s=0}^{m} \sum_{s_1=0}^{m_1} \frac{C_m^s C_{m_1}^{s_1} C_{L-m-m_1}^{\ell-s-s_1}}{C_L^\ell} \left[s_1 \leqslant \tfrac{\ell}{L}\big(m_1 + \min\{t, m-s\} - \varepsilon k\big) \right].$$

Эксперименты и выводы

- Переобучение наступает очень быстро — при доле пограничных объектов $\frac{m}{L}$ порядка ε.
- Интервал — слишком «богатое» семейство алгоритмов.
- В реальных семействах пограничный слой устроен иначе.

Постановка задачи рекуррентного вычисления Q_ε

$\mathfrak{I}(a) = \langle X_{av}, X'_{av}, c_{av} \rangle_{v \in V_a}$ — информация об алгоритме $a \in A$, необходимая для вычисления вероятности переобучения Q_ε.

Расслоение: $n(a_0, \mathbb{X}) \leqslant n(a_1, \mathbb{X}) \leqslant \cdots \leqslant n(a_D, \mathbb{X})$.

Дополнительное предположение: $n(a_0, \mathbb{X}) = 0$.

Пусть μ_d — пессимистичный метод обучения, выбирающий алгоритмы только из подмножества $A_d = \{a_0, \ldots, a_d\}$.

Задача (пересчёт Q_ε при добавлении алгоритма a_d)

Известна *информация* $\mathfrak{I}(a_t)$ *относительно метода* μ_{d-1} *для всех алгоритмов* a_t, $t \leqslant d-1$.

Вычислить *информацию* $\mathfrak{I}(a_t)$ *относительно метода* μ_d *для всех алгоритмов* a_t, $t \leqslant d$.

Теоремы о рекуррентном вычислении Q_ε

Теорема (об информации $\mathfrak{I}(a_d)$)

$$\left[\mu_d X{=}a_d\right] = \left[X'_d \subseteq \bar{X}\right], \quad X'_d = \left\{x_i \in \mathbb{X}\colon I(a_d, x_i) = 1\right\}.$$

Теорема (о коррекции информации $\mathfrak{I}(a_t)$, $t < d$)

Для каждого $v \in V_t$ такого, что $X_{tv} \cap X'_d = \varnothing$

1) *если $X'_d \setminus X'_{tv} = \{x_i\}$ — одноэлементное множество, то присоединить x_i к X_{tv};*
2) *если $|X'_d \setminus X'_{tv}| > 1$, то добавить в V_t индекс w, положив $c_{tw} = -c_{tv}$, $X_{tw} = X_{tv}$, $X'_{tw} = X'_{tv} \cup X'_d$;*
3) *если $|X'_d \setminus X'_{tv}| = 0$, то удалить из V_t индекс v.*

Упрощённое рекуррентное вычисление Q_ε

Теорема (О верхних и нижних оценках)

Если иногда пропускать шаг 2) при $c_{tv} = 1$,
то вычисляемое значение Q_ε может только увеличиться.

Если иногда пропускать шаг 2) при $c_{tv} = -1$,
то вычисляемое значение Q_ε может только уменьшиться.

Теорема (Об упрощённом рекуррентном вычислении Q_ε)

Если всегда пропускать шаг 2), то шаг 3) не будет выполняться никогда, и будет получена верхняя оценка Q_ε.

Рекуррентное вычисление Q_ε может занять время $O(L2^D)$.
Упрощённое рекуррентное вычисление Q_ε занимает $O(LD^2)$.
Его можно сократить до $O(LD)$ и даже до $O(L)$.

Расслоение и связность

Расслоение множества алгоритмов $A = \bigsqcup_{m=0}^{L} A_m$, где

$A_m = \{a \in A \colon n(a, \mathbb{X}) = m\}$ — *m-й слой* множества алгоритмов.

Отношение частичного порядка на алгоритмах:

$$a \prec a' \;\Leftrightarrow\; \big(I(a,x) \leqslant I(a',x),\ \forall x \in \mathbb{X}\big).$$

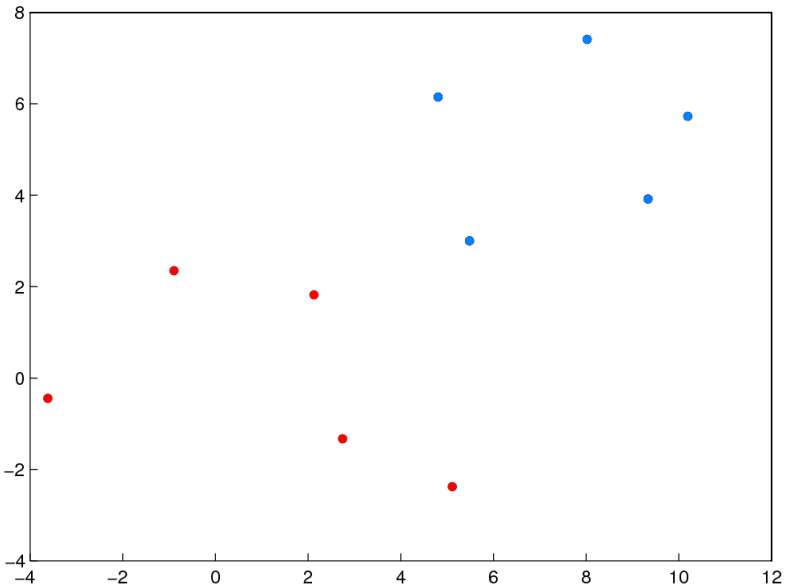
Связность $q(a)$ алгоритма $a \in A$ — число сравнимых с ним алгоритмов в следующем слое:

$$q(a) = \#\Big\{a' \colon a \prec a' \text{ и } n(a,\mathbb{X}) + 1 = n(a',\mathbb{X})\Big\}.$$

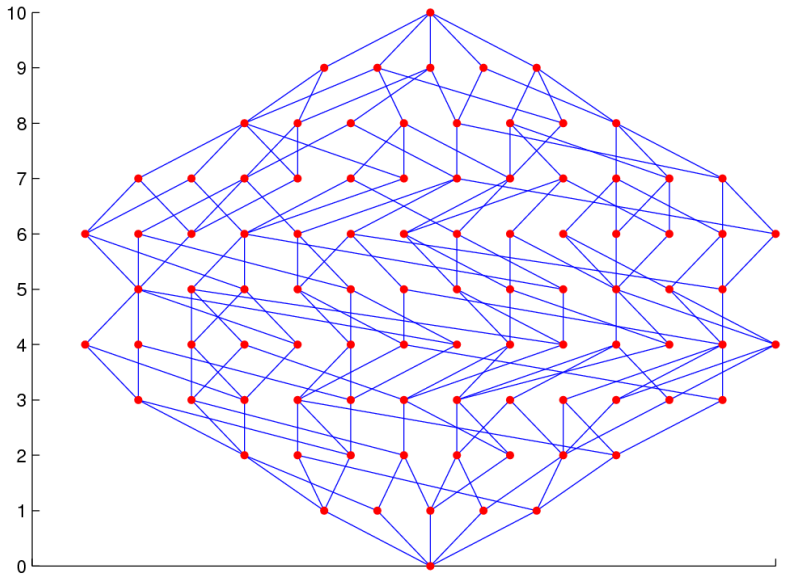
Граф связности множества алгоритмов A:
— вершины — алгоритмы,
— рёбра (a, a') — пары алгоритмов $a \prec a'$ в соседних слоях.

Граф расслоения и связности (пример)

Линейно разделимая выборка длины $L = 10$



Граф связности семейства линейных классификаторов



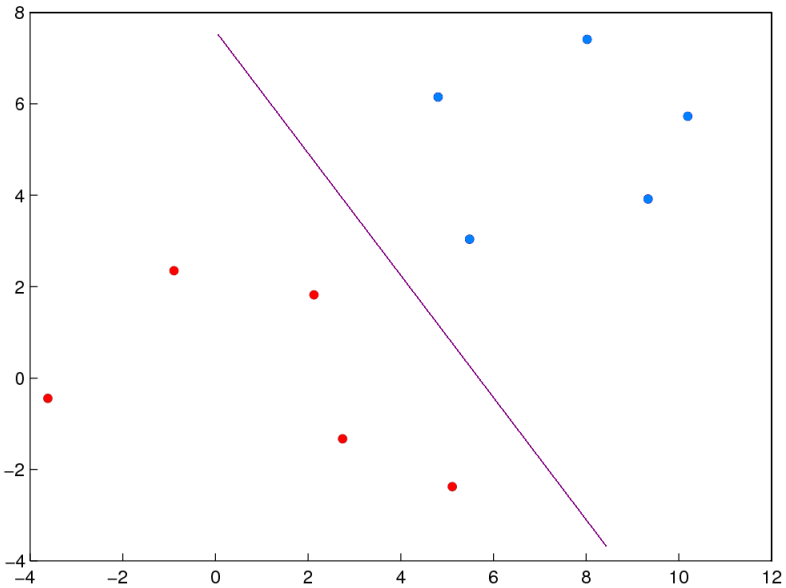
Вершины графа — это алгоритмы.

Рёбра — алгоритмы, различающиеся только на одном объекте.

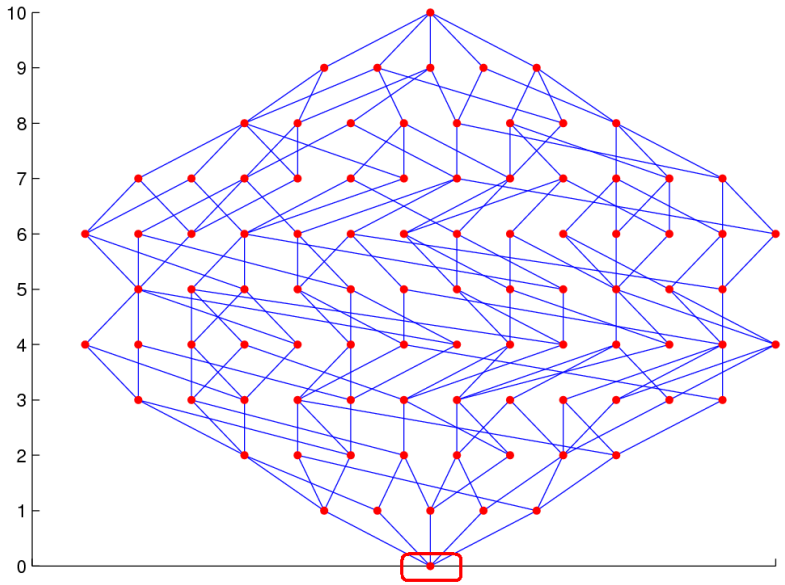
Горизонтальные слои соответствуют уровням числа ошибок m.

Граф расслоения и связности (пример)

Линейно разделимая выборка длины $L = 10$



Слой $m = 0$ из 1 алгоритма



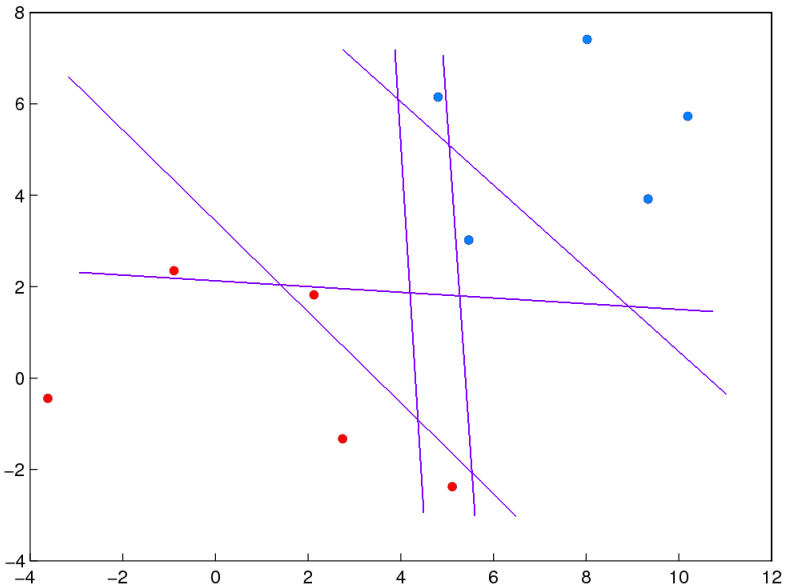
Вершины графа — это алгоритмы.

Рёбра — алгоритмы, различающиеся только на одном объекте.

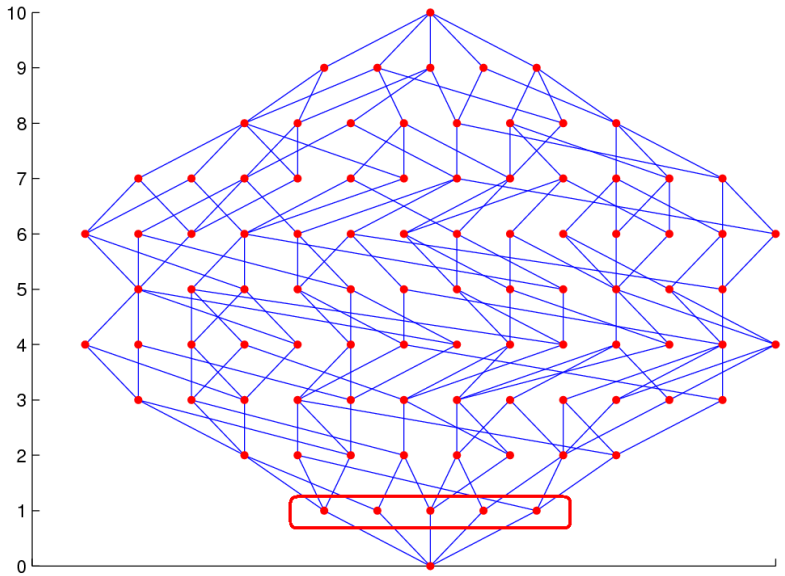
Горизонтальные слои соответствуют уровням числа ошибок m.

Граф расслоения и связности (пример)

Линейно разделимая выборка длины $L = 10$



Слой $m = 1$ из 5 алгоритмов



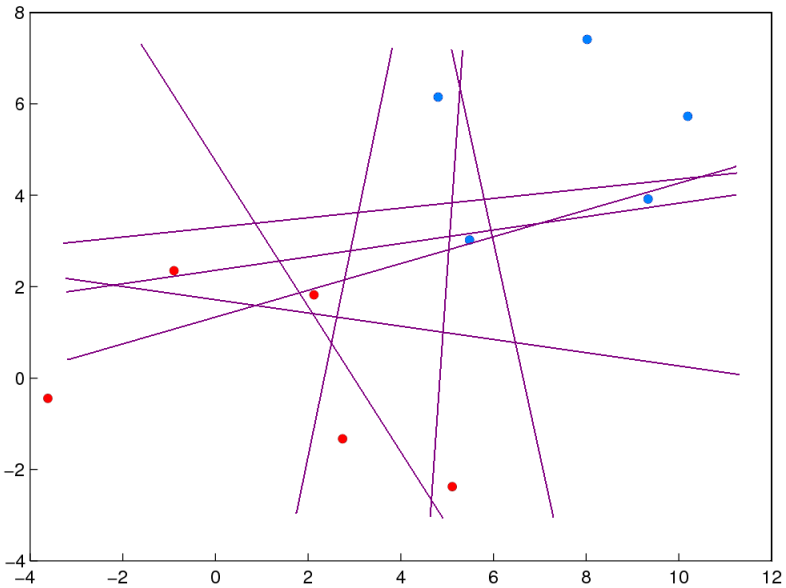
Вершины графа — это алгоритмы.

Рёбра — алгоритмы, различающиеся только на одном объекте.

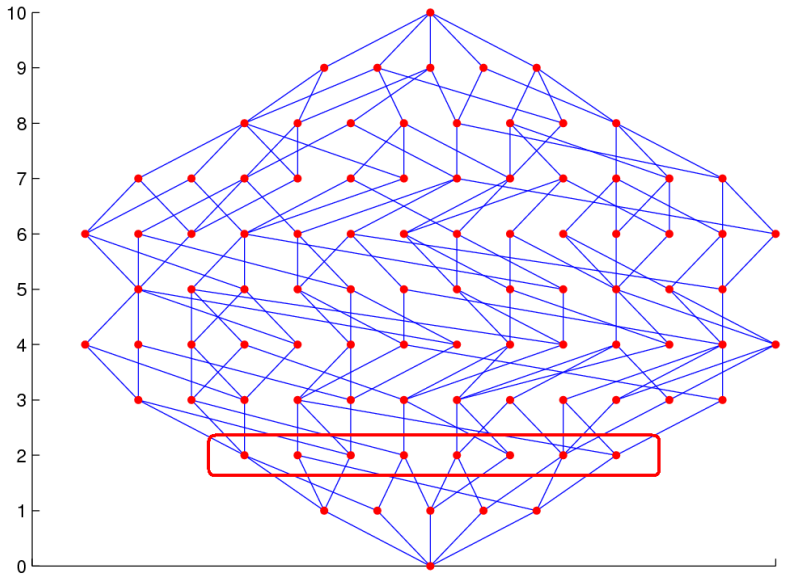
Горизонтальные слои соответствуют уровням числа ошибок m.

Граф расслоения и связности (пример)

Линейно разделимая выборка длины $L = 10$



Слой $m = 2$ из 8 алгоритмов



Вершины графа — это алгоритмы.

Рёбра — алгоритмы, различающиеся только на одном объекте.

Горизонтальные слои соответствуют уровням числа ошибок m.

Оценка Q_ε через профиль расслоения–связности

Опр. *Профиль расслоения–связности* Δ_{mq} — это число алгоритмов в m-м слое со связностью q.

Теорема

Пусть векторы ошибок всех алгоритмов $a \in A$ попарно различны, и в A есть корректный на $\mathbb{X}$ алгоритм.
Тогда справедлива верхняя оценка вероятности переобучения

$$Q_\varepsilon \leqslant \sum_{m=\lceil \varepsilon k \rceil}^{L} \sum_{q=0}^{\ell} \Delta_{mq} \frac{C_{L-m-q}^{\ell-q}}{C_L^\ell}.$$

Оценка Q_ε через профиль расслоения и профиль связности

Теорема

Пусть справедливы условия предыдущей теоремы и профиль расслоения–связности сепарабелен:

$$\Delta_{mq} \leqslant \Delta_m \lambda_q.$$

Тогда справедлива верхняя оценка вероятности переобучения

$$Q_\varepsilon \leqslant \underbrace{\sum_{m=\lceil \varepsilon k \rceil}^{k} \Delta_m \frac{C_{L-m}^{\ell}}{C_L^{\ell}}}_{VC\text{-оценка}} \underbrace{\sum_{q=0}^{L} \lambda_q \left(\frac{\ell}{L-m} \right)^q}_{\text{поправка на связность}}.$$

При известных Δ_m, λ_q вычисления Q_ε займут $O(L)$.

Эксперименты и выводы

В экспериментах с линейными классификаторами:

- средняя связность = размерности пространства (с очень высокой точностью);
- гипотеза сепарабельности выполнялась (с достаточной точностью);

Выводы

- Учёт расслоения и связности существенно уточняет оценку (экспоненциально по размерности пространства).
- Оценка зависит не от одной скалярной характеристики сложности, а от «профиля», в отличие от VC-оценок.
- Как использовать эту оценку на практике? (пока открытый вопрос)

Функционал полного скользящего контроля

Выше рассматривалась только *вероятность переобучения*

$$Q_\varepsilon(\mu, \mathbb{X}) = \frac{1}{C_L^\ell} \sum_{(X,\bar{X})} \big[\nu(\mu X, \bar{X}) - \nu(\mu X, X) \geqslant \varepsilon\big].$$

Вероятность большой частоты ошибок на контроле:

$$R_\varepsilon(\mu, \mathbb{X}) = \frac{1}{C_L^\ell} \sum_{(X,\bar{X})} \big[\nu(\mu X, \bar{X}) \geqslant \varepsilon\big].$$

Функционал полного скользящего контроля:

$$\mathrm{CCV}(\mu, \mathbb{X}) = \frac{1}{C_L^\ell} \sum_{(X,\bar{X})} \nu(\mu X, \bar{X}).$$

Недостаток: CCV характеризует лишь среднюю частоту ошибок, но не учитывает её разброс.

Метод ближайшего соседа

Пусть $\rho(x, x')$ — функция расстояния на множестве $\mathbb{X}$.

$$a(x; X) = y\big(\arg\min_{x' \in X} \rho(x, x')\big).$$

Определение (*профиль компактности* выборки $\mathbb{X}$)

доля объектов, у которых m-й сосед x_{im} лежит в другом классе:

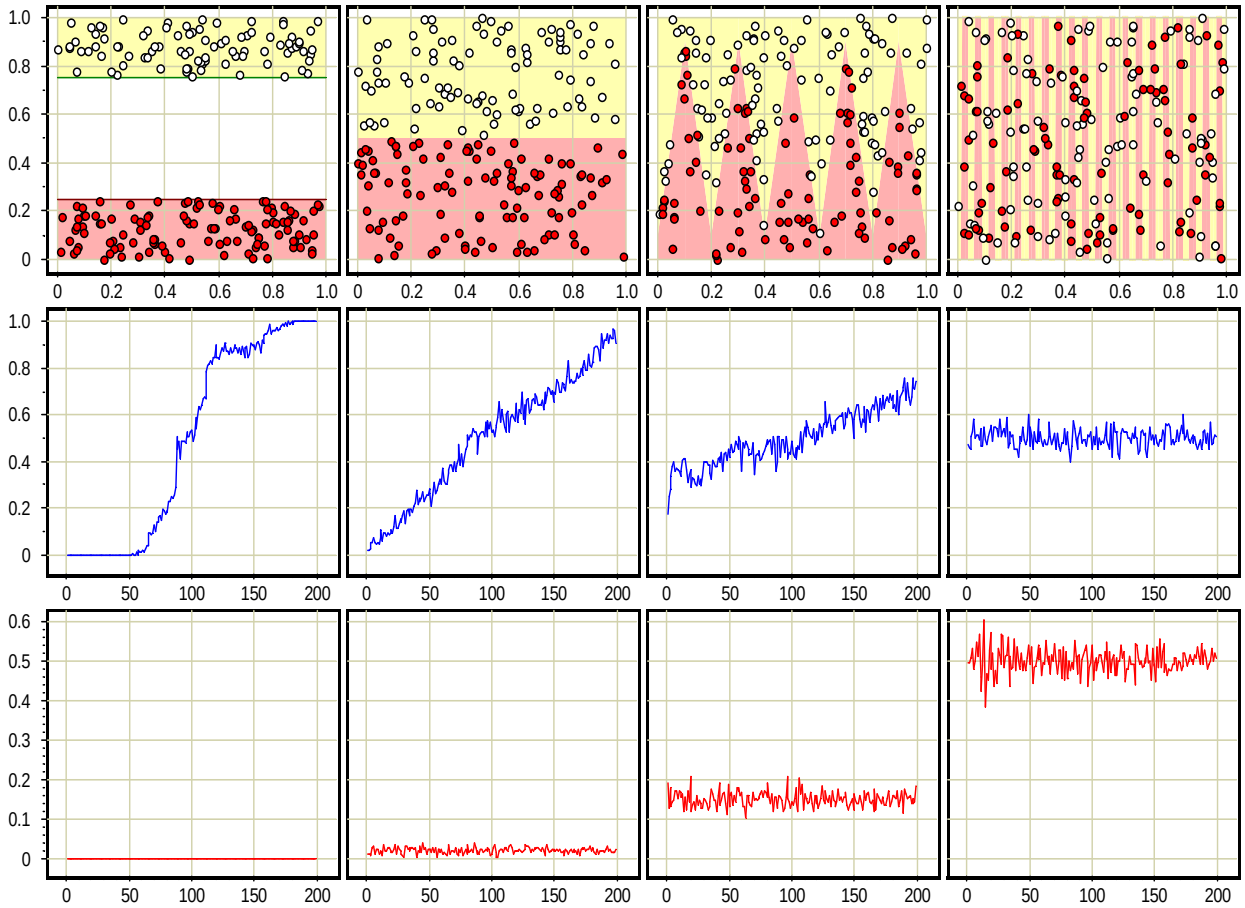
$$K(m, \mathbb{X}) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L} \big[y(x_i) \neq y(x_{im})\big]; \quad m = 1, \ldots, L-1,$$

Теорема (точная оценка для метода ближайшего соседа)

$$\mathrm{CCV}(\mu, \mathbb{X}) = \sum_{m=1}^{k} K(m, \mathbb{X}) \frac{C_{L-1-m}^{\ell-1}}{C_{L-1}^{\ell}}.$$

Профили компактности для серии модельных задач

средний ряд: профили компактности,
нижний ряд: зависимость CCV от длины контроля $k = |\bar{X}|$.



Свойства профиля компактности и оценки CCV
Выводы

- Полученная оценка CCV является *точной* (не завышенной, не асимптотической).
- CCV практически не зависит от длины контроля k (всегда ли? — открытый вопрос).
- Для минимизации CCV важен только начальный участок профиля, т. к. $\frac{C_{L-1-m}^{\ell-1}}{C_{L-1}^{\ell}} \longrightarrow 0$ экспоненциально по m.
- Минимизация CCV приводит к эффективному отбору эталонных объектов, без переобучения [М. Иванов, 2009].

Замечание. VC-теория вообще не даёт содержательных оценок для метода ближайшего соседа, т.к. ёмкость данного семейства алгоритмов бесконечна.

Монотонные алгоритмы классификации: определения

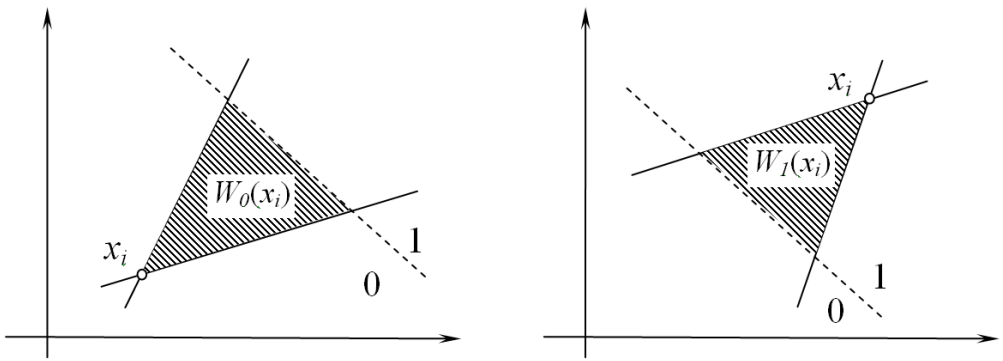
Задача классификации: $\mathbb{X}$ — ч. у. множество, $Y = \{0, 1\}$,
A — множество монотонных отображений $a\colon \mathbb{X} \to Y$.

Опр. *Степень немонотонности* выборки $\mathbb{X}$:

$$\theta(\mathbb{X}) = \min_{a \in A} \nu(a, \mathbb{X}).$$

Опр. *Верхний и нижний клин* объекта $x_i \in \mathbb{X}$:

$$W_0(x_i) = \{x \in \mathbb{X}\colon x_i < x \text{ и } y(x) = 0\};$$
$$W_1(x_i) = \{x \in \mathbb{X}\colon x < x_i \text{ и } y(x) = 1\}.$$



Профиль монотонности выборки

Определение (*Профиль монотонности* выборки $\mathbb{X}$)

доля объектов $x_i \in \mathbb{X}$ с клином мощности m:

$$M(m, \mathbb{X}) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L} \big[|W_{y(x_i)}(x_i)| = m \big]; \quad m = 0, \ldots, L-1.$$

Теорема

Пусть μ — метод минимизации эмпирического риска в классе всех монотонных функций, θ — степень немонотонности выборки $\mathbb{X}$. Тогда

$$\mathrm{CCV}(\mu, \mathbb{X}) \leqslant \sum_{m=0}^{\theta L + k - 1} M(m, \mathbb{X})\, H_{L-1}^{\ell, m}(\theta L)\,.$$

Свойства профиля монотонности и оценки CCV
Выводы

- Невырожденность: $\mathrm{CCV}(\mu, \mathbb{X}) \leqslant 1$.
- Для минимизации CCV важен только начальный участок профиля, т. к. $H_{L-1}^{\ell,m}(\theta L) \to 0$ по m при малых θ .
- Для минимизации CCV отношение порядка на множестве объектов $\mathbb{X}$ должно быть близко к линейному вблизи границы классов.
- Минимизация CCV приводит к повышению обобщающей способности алгоритмической композиции с монотонной корректирующей операцией [И. Гуз, 2008].

Замечание. VC-теория даёт сильно завышенные оценки для монотонных семейств алгоритмов (эффективная ёмкость определяется максимальной длиной антицепи).

Результаты, выносимые на защиту

1. Слабая вероятностная аксиоматика.
2. VC-оценки, учитывающие степень некорректности метода обучения.
3. Методика измерения факторов завышенности VC-оценок.
4. Метод получения точных оценок вероятности переобучения путём выделения порождающих и запрещающих множеств.
5. Рекуррентный алгоритм вычисления вероятности переобучения.
6. Блочный метод вывода точных оценок вероятности переобучения.
7. Точные оценки вероятности переобучения для 7 модельных семейств алгоритмов.
8. Верхние оценки вероятности переобучения через профиль расслоения и связности.
9. Точные оценки CCV для метода ближайшего соседа через профиль компактности выборки.
10. Верхние оценки CCV для монотонных алгоритмов через профиль монотонности выборки.