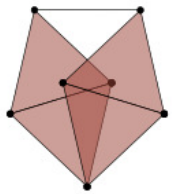
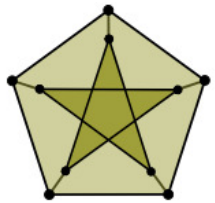
Теория и практика машинного обучения
• Лекция 3 •
Комбинаторная теория переобучения

Воронцов Константин Вячеславович
МФТИ • МГУ • ВШЭ • ВЦ РАН • Яндекс • FORECSYS



Комбинаторика и алгоритмы
для школьников



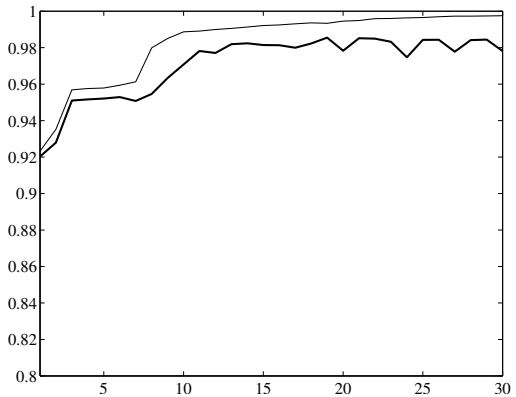
• Летняя школа — 2014 •
24 августа 2014

Содержание

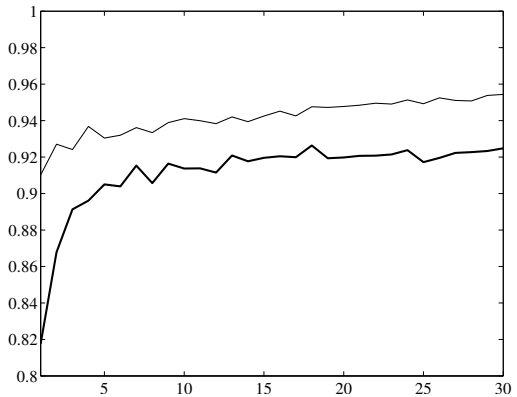
1. **Задача оценивания переобучения**
   - Явление переобучения
   - Понятие вероятности переобучения
   - Зачем нужны оценки переобучения
2. **Эксперименты с переобучением**
   - Эксперимент с монотонной цепью
   - Эксперимент с пороговыми классификаторами
   - Эксперимент с парой классификаторов
3. **Комбинаторная теория переобучения**
   - Гипергеометрическое распределение
   - Простые модельные семейства
   - Оценка расслоения-связности

Пример переобучения: задача диагностики по ЭКГ

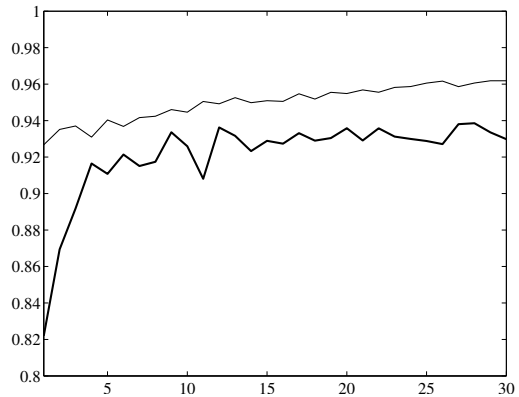
Зависимости AUC от числа используемых признаков K



некроз ГБК



хронический гастрит



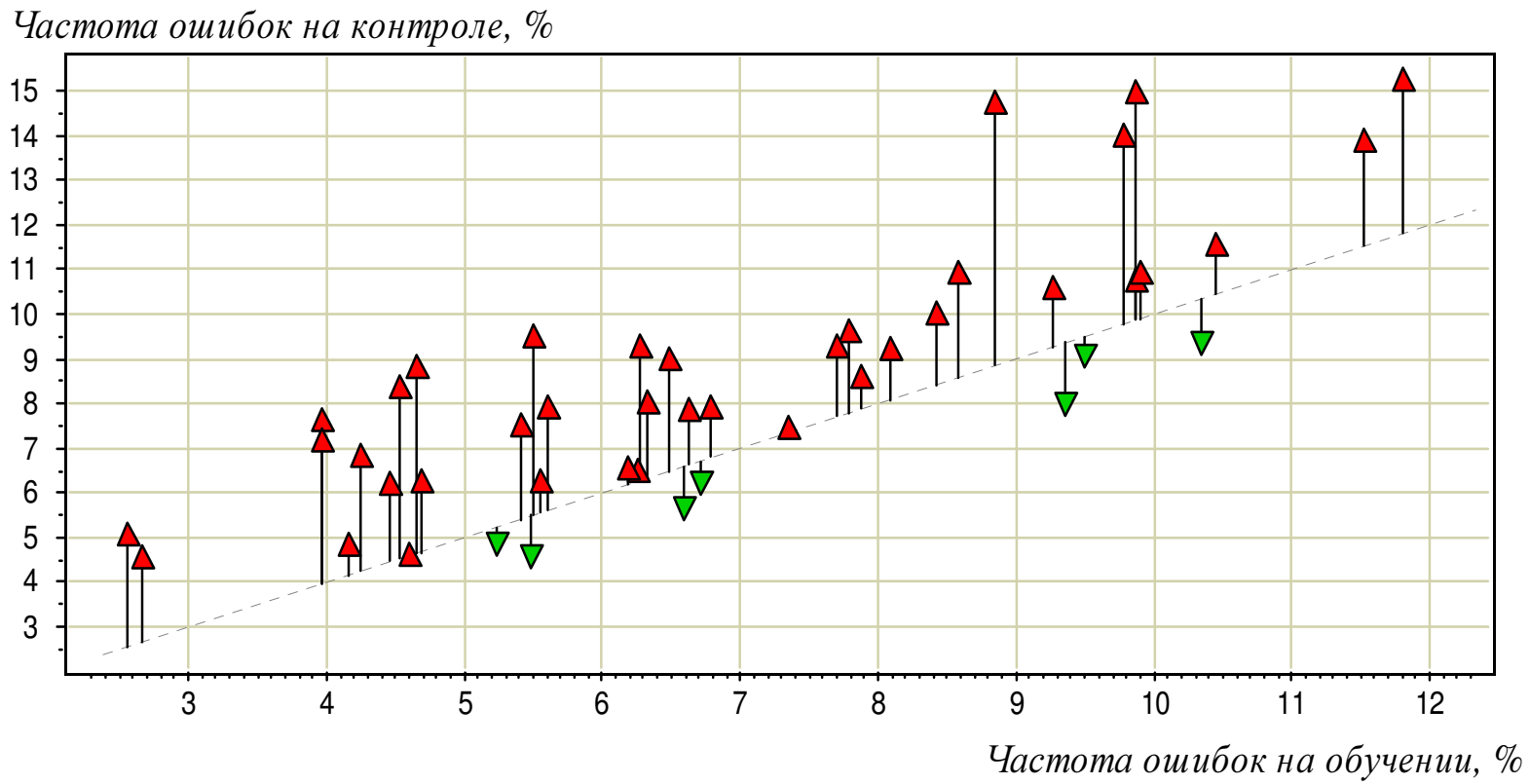
зоб щитовидный железы

Тонкая (верхняя) линия — на обучающей выборке
Толстая (нижняя) линия — на тестовой выборке

AUC на контроле систематически хуже, чем на обучении

Пример переобучения: ещё одна медицинская задача

Задача предсказания отдалённого результата хирургического лечения атеросклероза. Точки — различные алгоритмы.



Ошибки на контроле систематически чаще, чем на обучении

Пример переобучения: полиномиальная регрессия

Зависимость $y(x) = \dfrac{1}{1+25x^2}$ на отрезке $x \in [-2, 2]$.

Признаковое описание $x \mapsto (1, x^1, x^2, \ldots, x^n)$.

Модель полиномиальной регрессии

$$a(x, w) = w_0 + w_1 x + \cdots + w_n x^n \quad \text{— полином степени } n.$$

Обучение методом наименьших квадратов:

$$Q(w, X) = \sum_{i=1}^{\ell} (w_0 + w_1 x_i + \cdots + w_n x_i^n - y_i)^2 \to \min_{w_0, \ldots, w_n}.$$

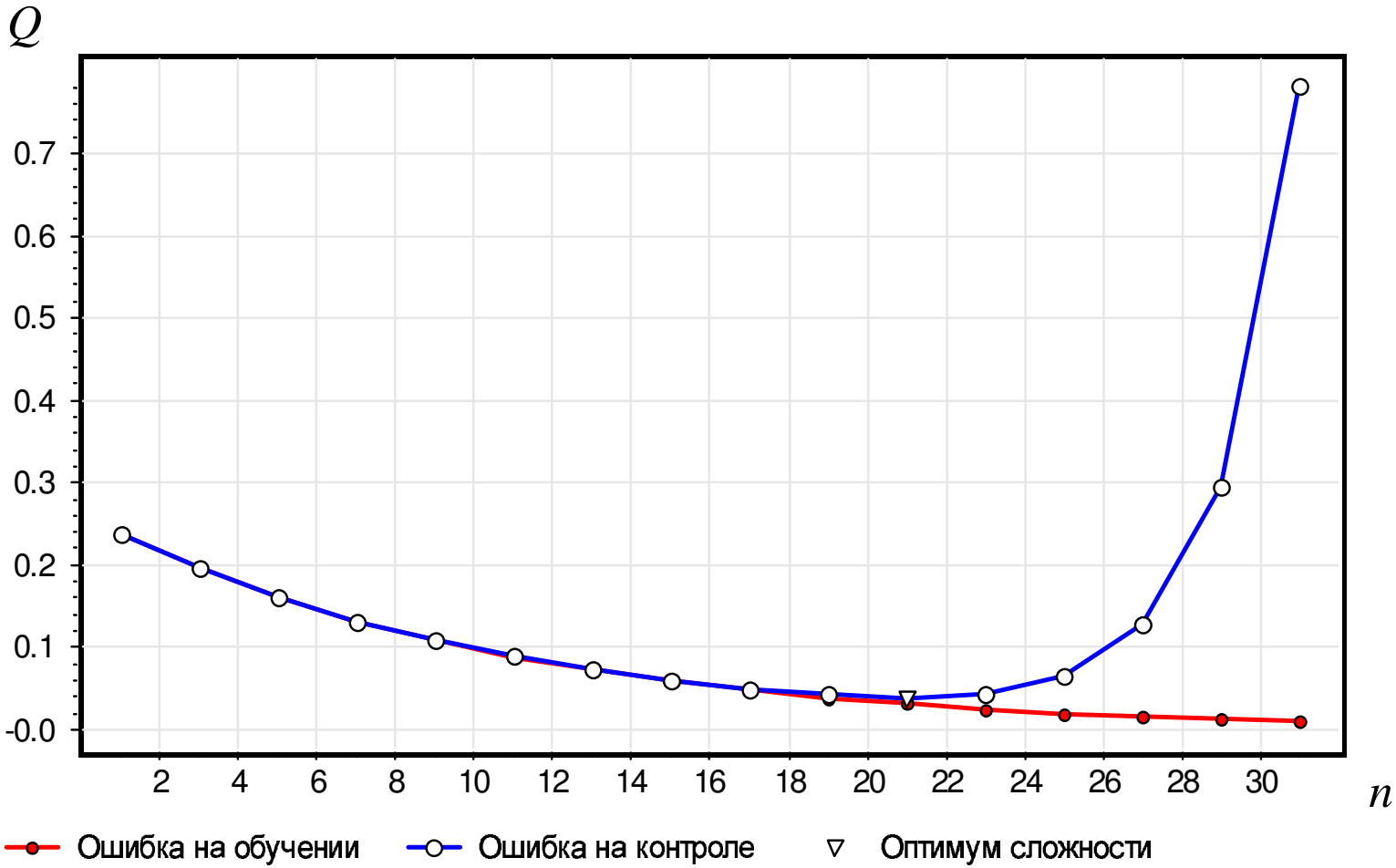
Обучающая выборка: $X = \left\{ x_i = 4\frac{i-1}{\ell-1} - 2 \;\middle|\; i = 1, \ldots, \ell \right\}$.

Контрольная выборка: $\bar{X} = \left\{ x_i = 4\frac{i-0.5}{\ell-1} - 2 \;\middle|\; i = 1, \ldots, \ell-1 \right\}$.

Что происходит с $Q\left(w^*, X\right)$ и $Q\left(w^*, \bar{X}\right)$ с ростом степени n?

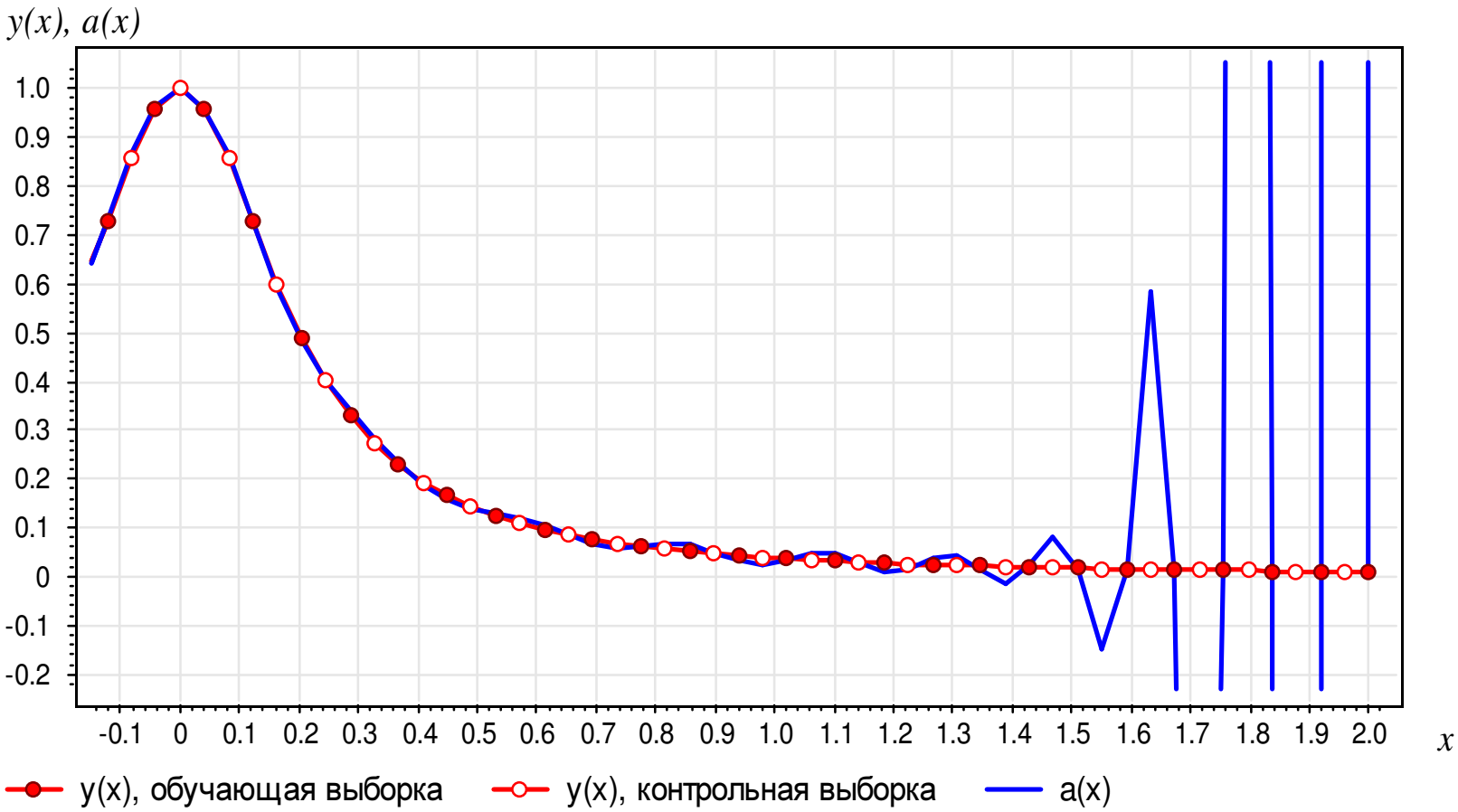
Пример переобучения: эксперимент при $\ell = 50,\ n = 1..31$

Переобучение — это когда $Q\left(w^*, \bar{X}\right) \gg Q\left(w^*, X\right)$:



Пример переобучения: эксперимент при $\ell = 50$

$y(x) = \dfrac{1}{1 + 25x^2}$; $a(x)$ — полином степени $n = 38$



Наша цель — лучше понять явление переобучения

- Почему возникает переобучение?
- Всегда ли оно возникает?
- Как оценить величину возможного переобучения?
- Как её уменьшить?

Бинарная функция потерь. Матрица ошибок

$X^L = \{x_1, \ldots, x_L\}$ — конечное *генеральное множество* объектов

$A = \{a_1, \ldots, a_D\}$ — конечное семейство *алгоритмов*

$I(a, x) = [\text{алгоритм } a \text{ ошибается на объекте } x]$

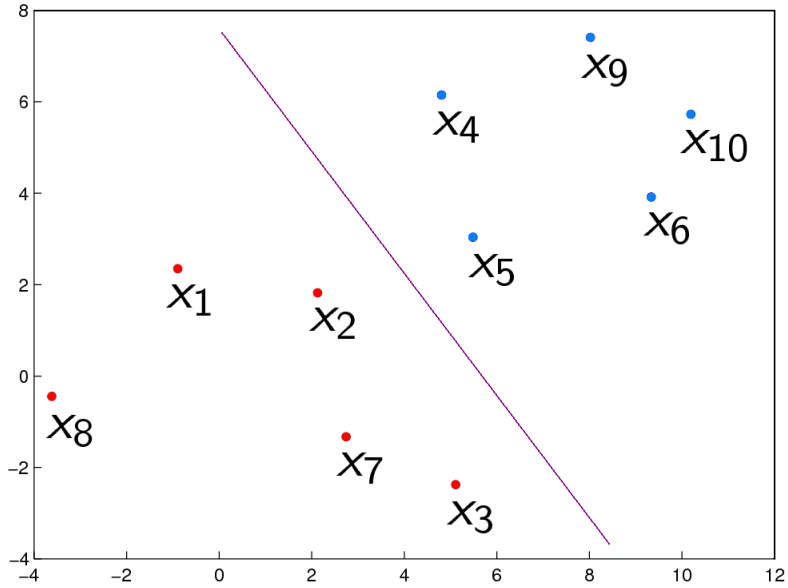
L×*D-матрица ошибок* с попарно различными столбцами:

	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 $k = L - \ell$

$n(a, U) = \sum_{x \in U} I(a, x)$ — *число ошибок* $a \in A$ на выборке $U \subset X^L$

$\nu(a, U) = \frac{1}{|U|} n(a, U)$ — *частота ошибок* a на выборке U

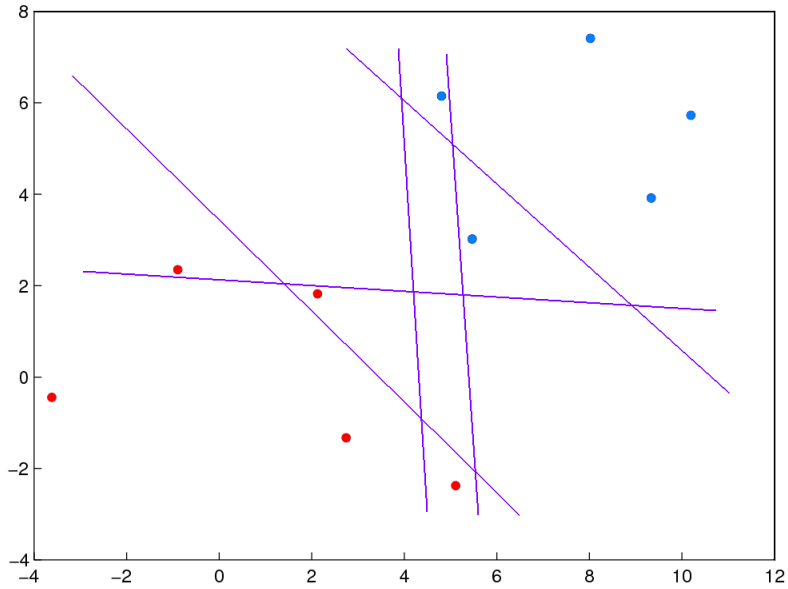
Пример. Матрица ошибок линейных классификаторов



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

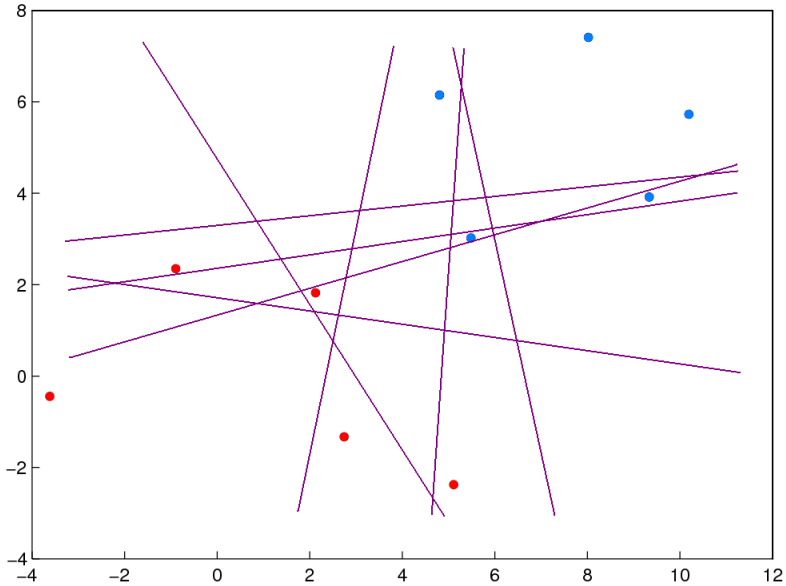


1 вектор с 0 ошибками

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

Метод обучения μ по выборке X строит алгоритм $a^* = \mu(X) \in A$
Пример — метод *минимизации эмпирического риска* (МЭР):

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

Переобученность $\delta(\mu, X) = \nu(a^*, \bar{X}) - \nu(a^*, X)$
Переобучение — это событие $\delta(\mu, X) \geqslant \varepsilon$

Основное вероятностное предположение:
все разбиения $X \sqcup \bar{X} = X^L$ равновероятны

Основная задача — оценить *вероятность переобучения*:

$$Q_\varepsilon(\mu, X^L) = \frac{1}{C_L^\ell} \sum_{X \subset X^L} \big[\delta(\mu, X) \geqslant \varepsilon\big] = \mathsf{P}\big[\delta(\mu, X) \geqslant \varepsilon\big]$$

Способ применения оценок переобучения

Допустим, получена оценка сверху:

$$Q_\varepsilon(\mu, X^L) = \mathsf{P}\big[\nu(a^*, \bar{X}) - \nu(a^*, X) \geqslant \varepsilon\big] \leqslant \eta(\varepsilon, \mu).$$

Тогда с вероятностью не менее $(1 - \eta)$

$$\nu(a^*, \bar{X}) \leqslant \nu(a^*, X) + \varepsilon(\eta, \mu),$$

где $\varepsilon(\eta, \mu)$ — функция, обратная к $\eta(\varepsilon, \mu)$.

Получаем критерий для выбора метода обучения μ:

$$\underbrace{\nu\big(\mu(X), X\big)}_{\text{эмпирический риск}} + \underbrace{\varepsilon\big(\eta, \mu\big)}_{\text{регуляризатор}} \to \min_\mu$$

(в частности, для отбора признаков или выбора модели).

Наводящие соображения

Обучение $a^* = \mu(X)$ — это выбор по неполной информации.
Чем больше вариантов выбора, тем сильнее можно ошибиться.
Переобучение должно увеличиваться с ростом числа $|A|$.

Но что значит «число различных алгоритмов»?

- Если два алгоритма различаются только на одном объекте, то это почти один и тот же алгоритм.
- Если из двух алгоритмов один очень хороший, а второй явно очень плохой, то даже неполной информации хватит, чтобы почти никогда не выбирать второй.
  Значит, и в этом случае мы имеем, скорее, один алгоритм.

Так сколько же у нас реальных вариантов выбора?

Эксперименты с модельными семействами алгоритмов

Физика — экспериментальная, естественная наука, часть естествознания. Математика — это та часть физики, в которой эксперименты дёшевы [академик В.И.Арнольд]

Хотим экспериментально обнаружить, какие свойства матрицы ошибок влияют на вероятность переобучения.

1. Будем изучать *модельные семейства алгоритмов*, задавая их непосредственно своими матрицами ошибок.
2. Будем оценивать вероятность методом Монте–Карло — как долю разбиений выборки из случайного подмножества N разбиений, $|N|$ порядка 10^3–10^4:

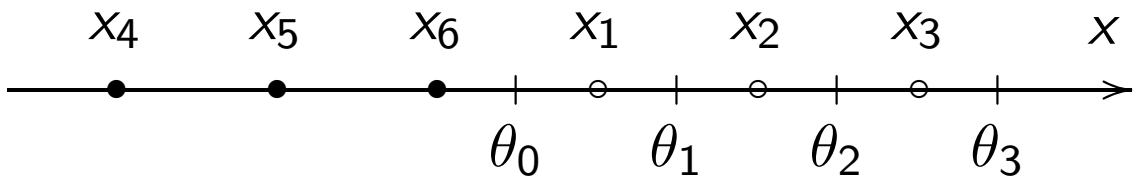
$$\hat{Q}_\varepsilon(\mu, X^L) = \frac{1}{|N|} \sum_{X \in N} \Big[\nu\big(\mu(X), \bar{X}\big) - \nu\big(\mu(X), X\big) \geqslant \varepsilon \Big].$$

Монотонная цепь классификаторов

Одномерное пороговое решающее правило:

$$a_d(x) = [x \geqslant \theta_d], \qquad d = 0, \ldots, D$$

Пример:
2 класса $\{\bullet, \circ\}$
6 объектов

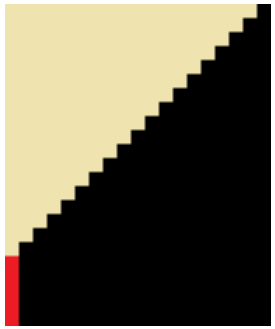
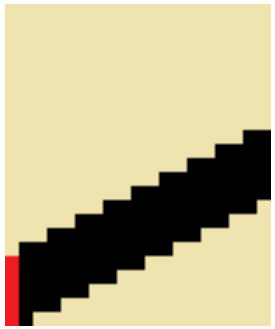


Матрица потерь:

	a_0	a_1	a_2	a_3
x_1	0	1	1	1
x_2	0	0	1	1
x_3	0	0	0	1
x_4	0	0	0	0
x_5	0	0	0	0
x_6	0	0	0	0

Эксперимент с монотонной цепью и ещё тремя семействами

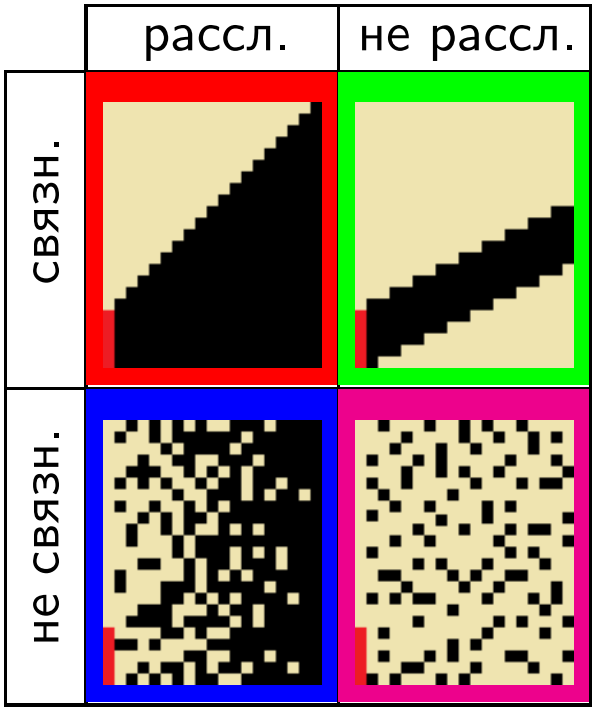
Четыре матрицы ошибок с одинаковым лучшим алгоритмом:

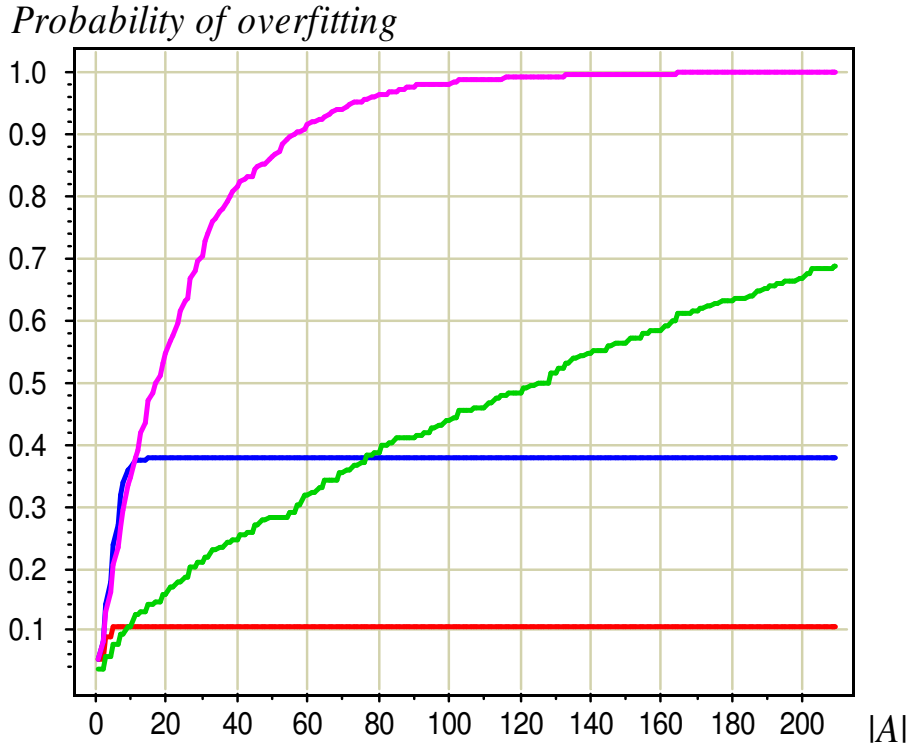
	с расслоением по числу ошибок	без расслоения по числу ошибок
со связностью: соседние алгоритмы отличаются в 1 объекте (образуется *цепь*)		
без связности: соседние алгоритмы существенно различны (*цепь* не образуется)		

Постепенно добавляя алгоритмы в $\{a_1, \ldots, a_D\}$, построим зависимости вероятности переобучения Q_ε от числа D.

Эксперимент с монотонной цепью и ещё тремя семействами

$\ell = k = 100$, $m = 10$, $\varepsilon = 0.05$, $|N| = 10^4$ разбиений Монте-Карло.



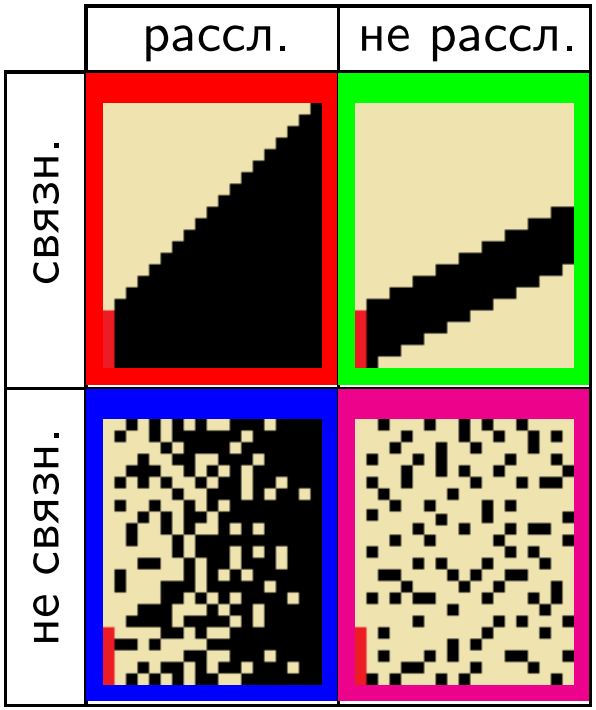


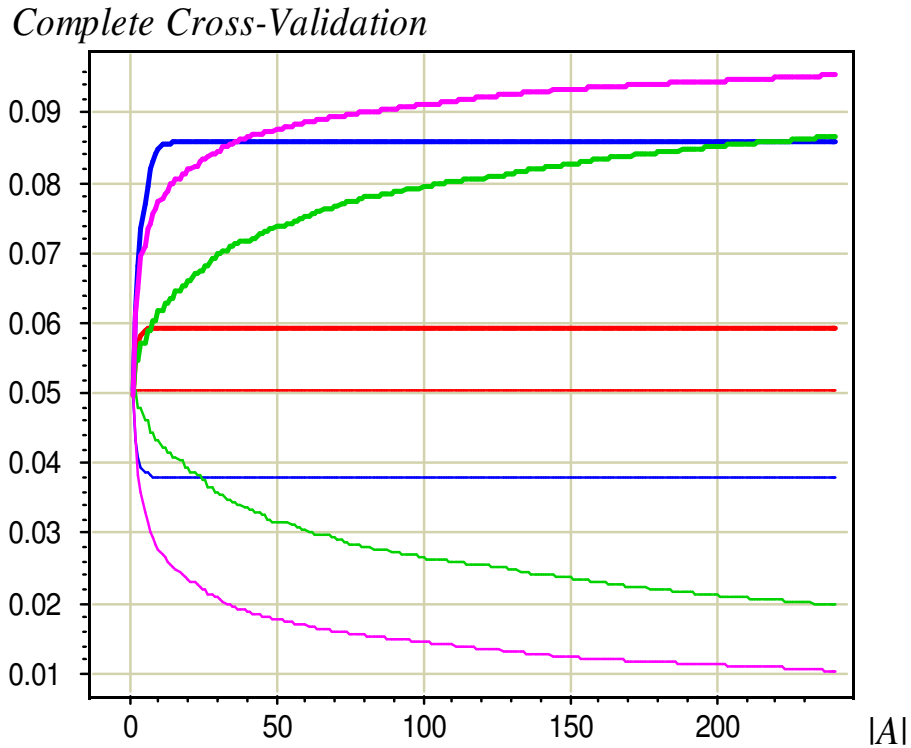
- Огромные семейства с P&C могут почти не переобучаться
- Без P&C уже 30 алгоритмов могут сильно переобучаться

Эксперимент с монотонной цепью и ещё тремя семействами

Оценка кросс-валидации (Complete Cross-Validation, CCV)

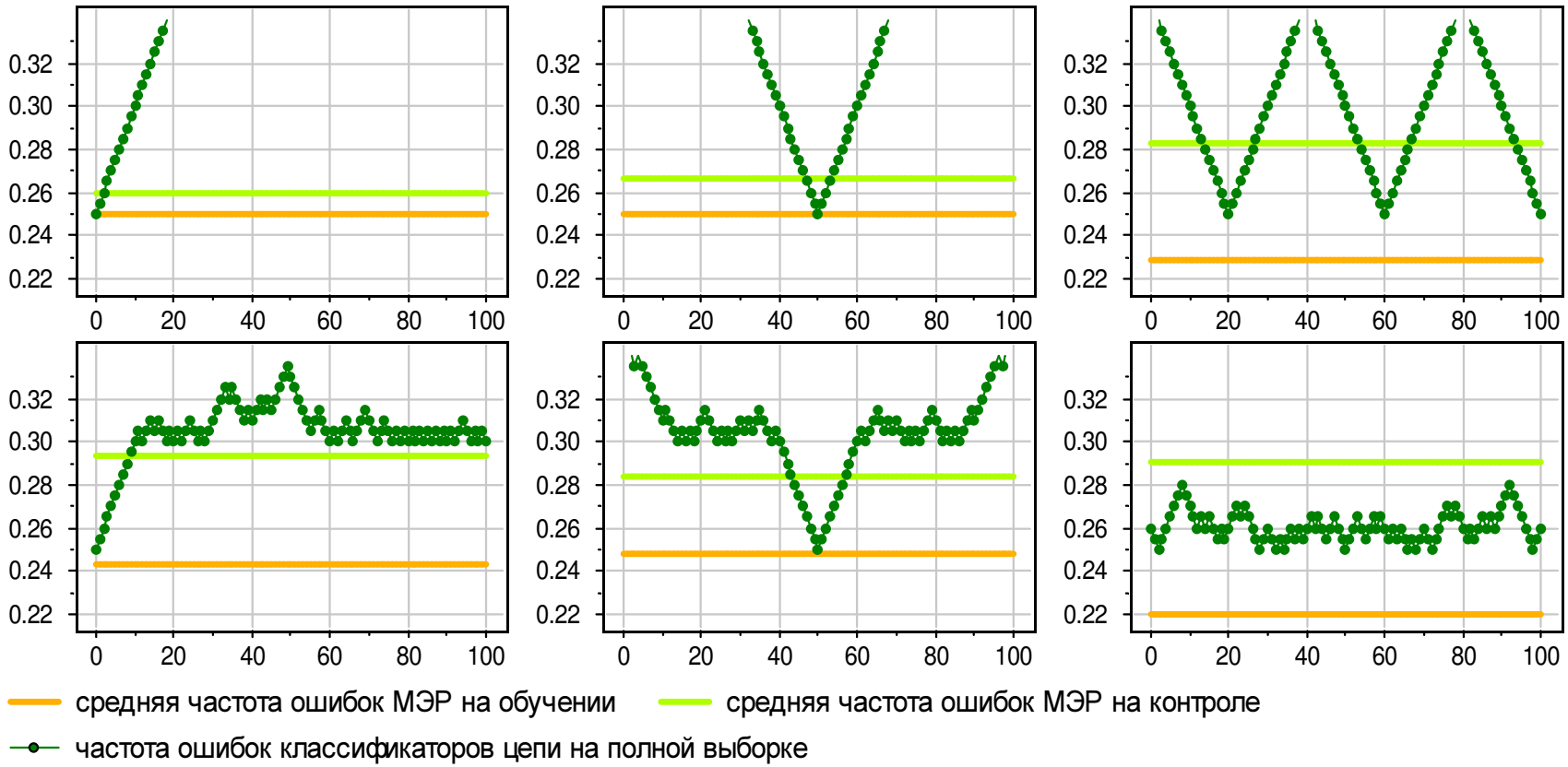
$$CCV(\mu, X^L) = \frac{1}{C_L^\ell} \sum_{X \subset X^L} \nu(\mu(X), \bar{X})$$





Эксперимент. Переобучение цепей с различным расслоением

Условия эксперимента: $\ell = k = 50,\ m = 25,\ \varepsilon = 0.05,$
метод Монте-Карло по $|N| = 10^4$ случайных разбиений.



Семейство из двух алгоритмов $A = \{a_1, a_2\}$

Пусть для алгоритмов a_1, a_2 известны m_0, m_1, m_2, m_3:

$$a_1 = (1, \ldots, 1,\ 1, \ldots, 1,\ 0, \ldots, 0,\ 0, \ldots, 0);$$
$$a_2 = (\underbrace{1, \ldots, 1}_{m_0},\ \underbrace{0, \ldots, 0}_{m_1},\ \underbrace{1, \ldots, 1}_{m_2},\ \underbrace{0, \ldots, 0}_{m_3}).$$

Расстояние Хэмминга между векторами ошибок:

$$r(a_1, a_2) = \sum_{i=1}^{L} \left| I(a_1, x_i) - I(a_2, x_i) \right| = m_1 + m_2$$

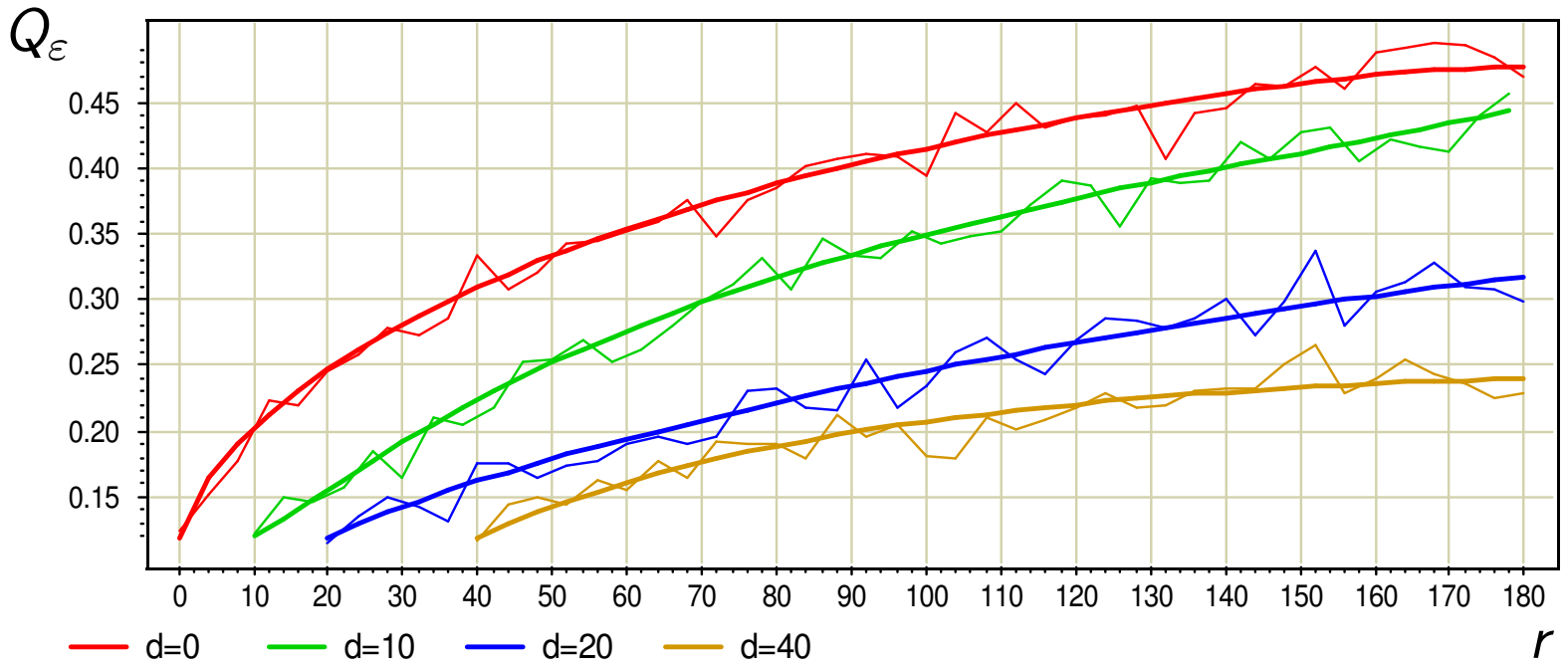
Расслоение измеряется разностью числа ошибок:

$$d(a_1, a_2) = \left| n(a_1, X^L) - n(a_2, X^L) \right| = |m_1 - m_2|$$

Условия эксперимента: $\ell = k = 100$, $m_0 = 20$, $\varepsilon = 0.05$, метод Монте-Карло по $|N| = 10^4$ случайных разбиений.

Эффекты сходства и расслоения для пары алгоритмов

Зависимость вероятности переобучения Q_ε
от расстояния Хэмминга r и расслоения d:



- переобучение возникает даже при выборе из двух алгоритмов
- чем более они схожи, тем меньше переобучение
- чем больше расслоение, тем меньше переобучение

Тривиальный частный случай $A = \{a\}$

Пусть $A = \{a\}$ — одноэлементное множество, $m = n(a, X^L)$.

Тогда вероятность переобучения есть вероятность большого отклонения частот ошибок в двух подвыборках:

$$Q_\varepsilon(a, X^L) = \mathsf{P}\big[\nu\big(a, \bar{X}\big) - \nu\big(a, X\big) \geqslant \varepsilon\big].$$

Теорема

Для любого X^L, любого $\varepsilon \in [0, 1]$

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

где $\mathcal{H}_L^{\ell,\, m}(z) = \sum_{s=0}^{\lfloor z \rfloor} \frac{C_m^s C_{L-m}^{\ell-s}}{C_L^\ell}$ — функция гипергеометрического распределения.

Доказательство

1. Обозначим $s = n(a, X)$.

2. Школьная задача по теории вероятностей:
в урне L шаров, m из них чёрные; извлекаем ℓ шаров наугад.
Какова вероятность того, что s из них чёрные?

$$\mathsf{P}\big[n(a,X) = s\big] = C_m^s C_{L-m}^{\ell-s} / C_L^\ell.$$

3. Распишем Q_ε, подставив $\nu(a,\bar{X}) = \frac{m-s}{k}$, $\nu(a,X) = \frac{s}{\ell}$:

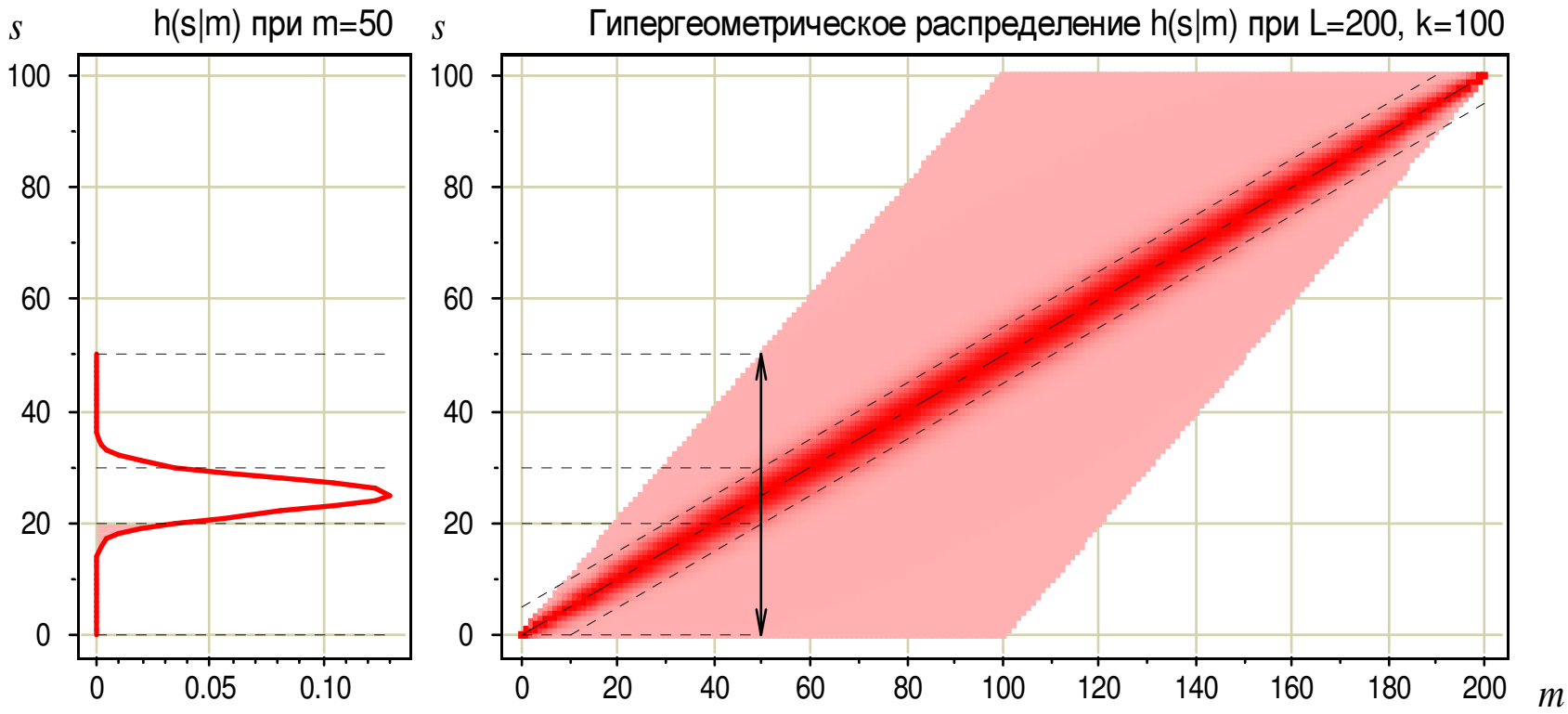
$$Q_\varepsilon(a, X^L) = \mathsf{P}\big[\nu\big(a,\bar{X}\big) - \nu\big(a,X\big) \geqslant \varepsilon\big] =$$

$$= \sum_{s=0}^{\ell} \Big[\underbrace{\tfrac{m-s}{k} - \tfrac{s}{\ell} \geqslant \varepsilon}_{s \leqslant \frac{\ell}{L}(m-\varepsilon k)}\Big] \underbrace{\mathsf{P}\big[n(a,X) = s\big]}_{C_m^s C_{L-m}^{\ell-s} / C_L^\ell} =$$

$$= \mathcal{H}_L^{\ell,\,m}\left(\tfrac{\ell}{L}(m - \varepsilon k)\right). \qquad \blacksquare$$

Гипергеометрическое распределение $h(s|m) = C_m^s C_{L-m}^{\ell-s} / C_L^\ell$

Гипергеометрическое распределение $h(s|m) = C_m^s C_{L-m}^{\ell-s} / C_L^\ell$



Предсказание числа $m = n(a, X^L)$ по числу $s = n(a, X)$ возможно благодаря узости гипергеометрического пика, причём при $\ell, k \to \infty$ он сужается, и $\nu(a, X) \to \nu(a, \bar{X})$ (явление *концентрации вероятности*, закон больших чисел).

Семейство из двух алгоритмов $A = \{a_1, a_2\}$

Пусть для алгоритмов a_1, a_2 известны m_0, m_1, m_2, m_3:

$$a_1 = (1, \ldots, 1,\ 1, \ldots, 1,\ 0, \ldots, 0,\ 0, \ldots, 0);$$
$$a_2 = (\underbrace{1, \ldots, 1}_{m_0},\ \underbrace{0, \ldots, 0}_{m_1},\ \underbrace{1, \ldots, 1}_{m_2},\ \underbrace{0, \ldots, 0}_{m_3}).$$

Теорема

Если метод μ минимизирует эмпирический риск, $A = \{a_1, a_2\}$, то для любого $\varepsilon \in [0, 1]$

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

Монотонная цепь алгоритмов $A = \{a_0, a_1, \ldots, a_D\}$

При каких условиях a_d окажется результатом обучения?

	a_0	a_1	a_2	a_3	$\ldots$	a_{D-1}	a_D
x_1	0	1	1	1	$\ldots$	1	1
x_2	0	0	1	1	$\ldots$	1	1
x_3	0	0	0	1	$\ldots$	1	1
$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$
x_D	0	0	0	0	$\ldots$	0	1
$L-D-m$	0	0	0	0	$\ldots$	0	0
	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$
	0	0	0	0	$\ldots$	0	0
m	1	1	1	1	$\ldots$	1	1
	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$
	1	1	1	1	$\ldots$	1	1

$$X_d = \{x_{d+1}\}$$
$$X'_d = \{x_1, \ldots, x_d\}$$

$$[\mu(X) = a_d] = \begin{cases} [X_d \subseteq X]\,[X'_d \subseteq \bar{X}], & d \leqslant k,\ d < D; \\ [X'_d \subseteq \bar{X}], & d \leqslant k,\ d = D; \\ 0, & d > k. \end{cases}$$

Порождающие и запрещающие множества

Опр. Если для алгоритма a найдутся множества объектов X_a и X'_a такие, что для всех обучающих выборок X, $|X| = \ell$

$$\big[\mu(X){=}a\big] = \big[X_a \subseteq X\big]\big[X'_a \subseteq \bar{X}\big],$$

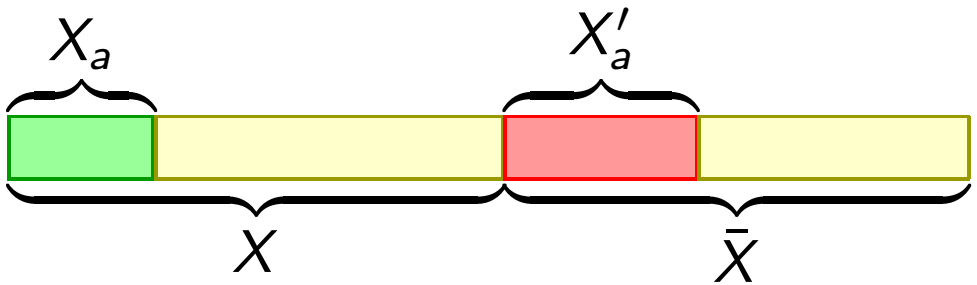
то X_a называется *порождающим*, X'_a — *запрещающим*.

Лемма

Вероятность получить в результате обучения алгоритм a

$$P_a = \mathsf{P}\big[\mu(X){=}a\big] = \mathsf{P}\big[X_a \subseteq X\big]\big[X'_a \subseteq \bar{X}\big] = \frac{C_{L_a}^{\ell_a}}{C_L^{\ell}},$$

где $L_a = L - |X_a| - |X'_a|$, $\ell_a = \ell - |X_a|$.



Основная теорема

Теорема

Если у каждого алгоритма есть множества X_a и X'_a, то

$$Q_\varepsilon(\mu, X^L) = \sum_{a \in A} P_a \mathcal{H}_{L_a}^{\ell_a, m_a}\left(s_a(\varepsilon)\right),$$

где $m_a = n(a, X^L \backslash X_a \backslash X'_a)$, $s_a(\varepsilon) = \frac{\ell}{L}\big(n(a, X^L) - \varepsilon k\big) - n(a, X_a)$.

Доказательство.

$$Q_\varepsilon = \mathsf{P}\big[\nu\big(\mu(X), \bar{X}\big) - \nu\big(\mu(X), X\big) \geqslant \varepsilon\big] =$$

$$= \mathsf{P} \sum_{a \in A} \big[\mu(X) = a\big] \sum_{s=0}^{\ell_a} \big[n(a, X \backslash X_a) = s\big] \underbrace{\big[\nu\big(a, \bar{X}\big) - \nu\big(a, X\big) \geqslant \varepsilon\big]}_{s \leqslant s_a(\varepsilon)}$$

$$= \sum_{a \in A} \sum_{s=0}^{s_a(\varepsilon)} \mathsf{P}\big[X_a \subseteq X\big] \big[X'_a \subseteq \bar{X}\big] \big[n(a, X \backslash X_a) = s\big] \ldots$$

Завершение доказательства

Итак, нам надо оценить $\mathsf{P}\big[X_a \subseteq X\big]\big[X'_a \subseteq \bar{X}\big]\big[n(a, X\backslash X_a) = s\big]$, это доля вот таких разбиений выборки:

$$a = \Big(\underbrace{X_a; \overbrace{1,\ldots,1}^{s}; \underbrace{0,\ldots,0}_{X\backslash X_a}}_{X}; \underbrace{X'_a; \overbrace{1,\ldots,1}^{m_a-s}; \underbrace{0,\ldots,0}_{\bar{X}\backslash X'_a}}_{\bar{X}} \Big)$$

Число таких разбиений равно $C_{m_a}^{s} C_{L_a-m_a}^{\ell_a-s}$, подставляем в Q_ε:

$$Q_\varepsilon = \sum_{a\in A} \sum_{s=0}^{s_a(\varepsilon)} \frac{C_{m_a}^{s} C_{L_a-m_a}^{\ell_a-s}}{C_L^\ell} = \sum_{a\in A} \left(\frac{C_{L_a}^{\ell_a}}{C_L^\ell}\right) \left(\sum_{s=s_0}^{s_a(\varepsilon)} \frac{C_{m_a}^{s} C_{L_a-m_a}^{\ell_a-s}}{C_{L_a}^{\ell_a}} \right) =$$

$$= \sum_{a\in A} P_a \mathcal{H}_{L_a}^{\ell_a, m_a}\big(s_a(\varepsilon)\big). \qquad \blacksquare$$

Вернёмся к монотонной цепи

Опр. Метод μ — *пессимистичный МЭР*, если он из множества алгоритмов, лучших на обучении, выбирает худший на контроле:

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

Теорема

Пусть $A = \{a_0, \ldots, a_D\}$ — монотонная цепь алгоритмов, $m = n(a_0, X^L)$, метод μ — пессимистичный МЭР.
Тогда вероятность переобучения равна

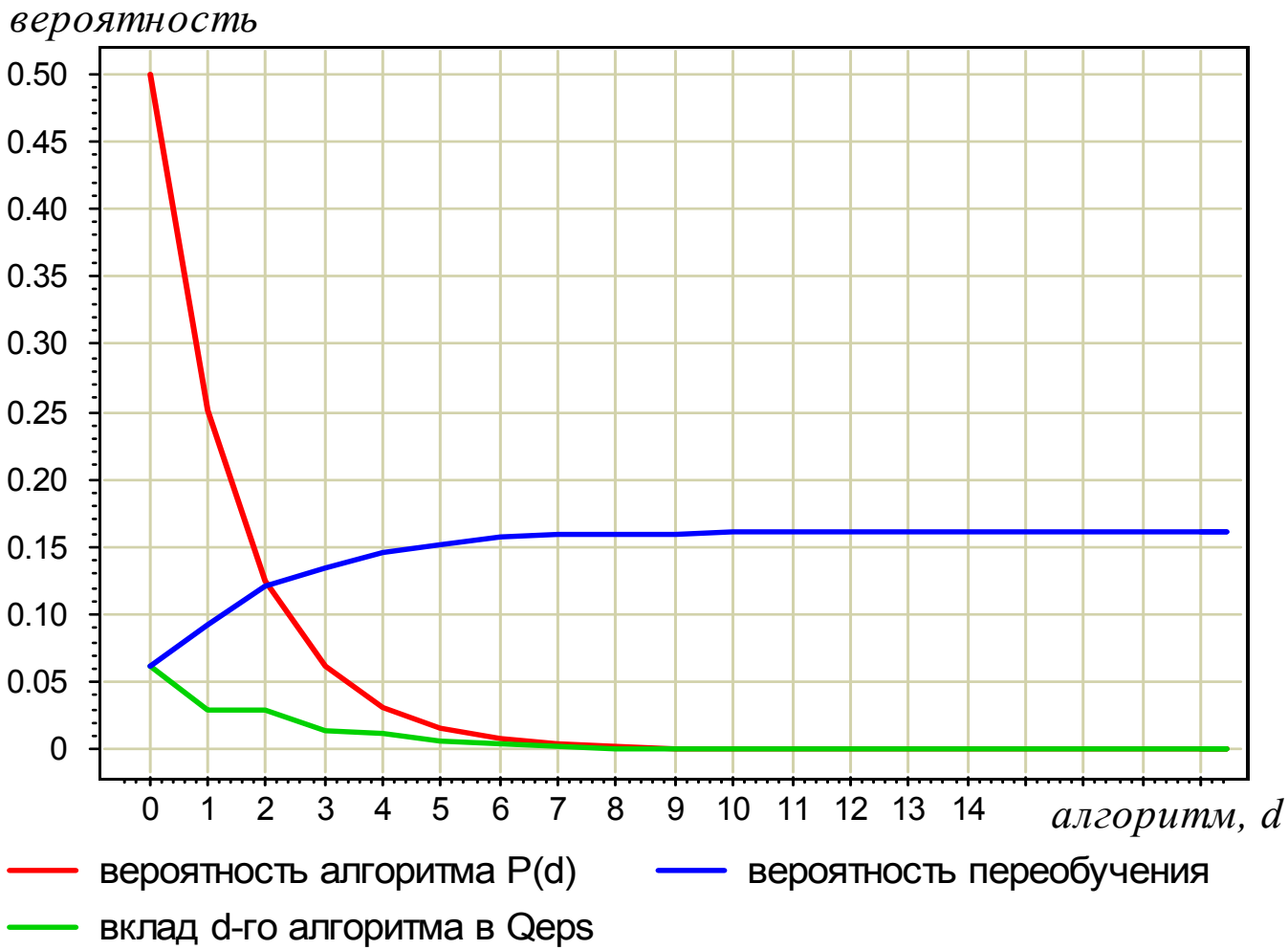
$$Q_\varepsilon = \sum_{d=0}^{\min\{k,D\}} \frac{C_{L-d-\delta}^{\ell-\delta}}{C_L^\ell} \mathcal{H}_{L-d-\delta}^{\ell-\delta, m}\left(\tfrac{\ell}{L}(m + d - \varepsilon k)\right),$$

где $\delta = [d < D]$.

Доказательство: подставить уже найденные X_a, X'_a в теорему.

Расчёт по выведенной формуле

Условия эксперимента: $\ell = k = 100, \quad m = 20, \quad \varepsilon = 0.05$



Граф расслоения–связности множества алгоритмов

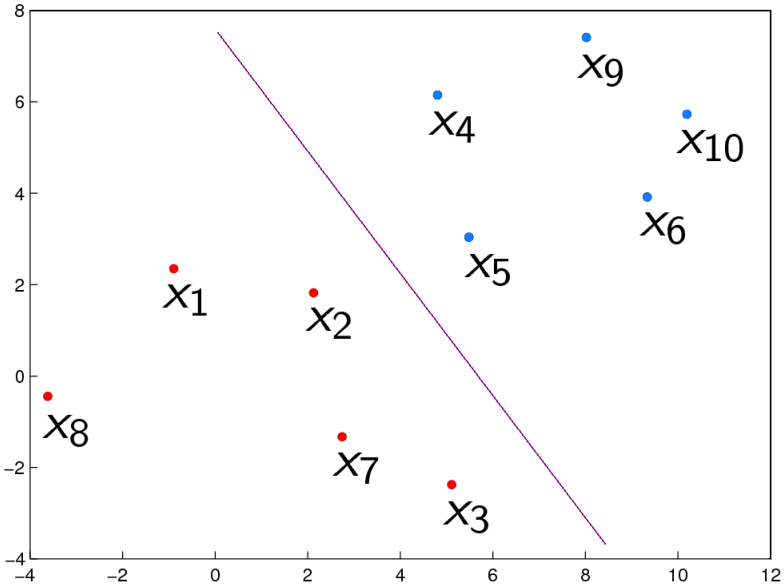
Определим бинарные отношения на множестве алгоритмов A:
частичный порядок $a \leqslant b$: $I(a,x) \leqslant I(b,x)$ для всех $x \in X^L$;
предшествование $a \prec b$: $a \leqslant b$ и $r(a,b) = 1$.

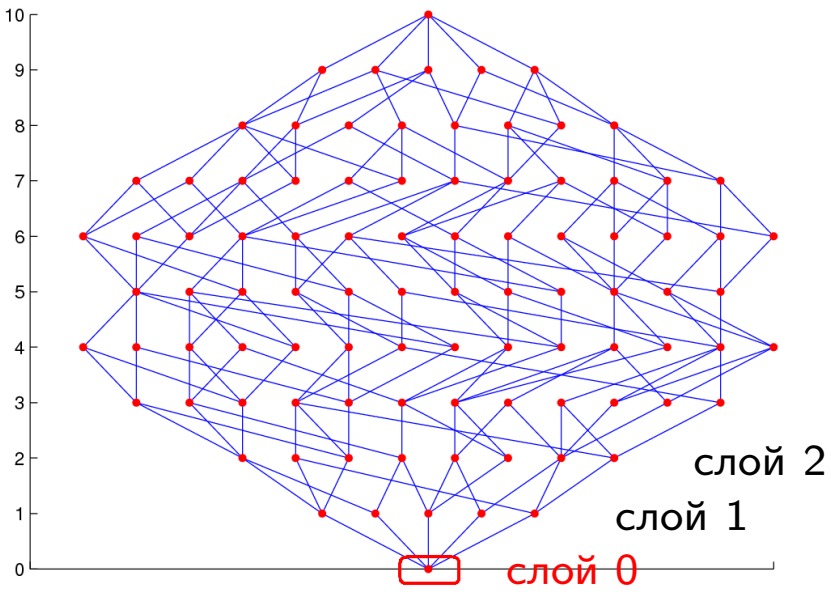
Опр. *Граф расслоения–связности* $\langle A, E \rangle$:
A — множество попарно различных векторов ошибок;
$E = \{(a,b) \colon a \prec b\}$.

Свойства графа расслоения–связности:

- это подграф графа Хáссе отношения порядка $\leqslant$ на A;
- каждому ребру (a,b) соответствует объект $x_{ab} \in X^L$, такой, что $I(a,x_{ab}) = 0, \quad I(b,x_{ab}) = 1$;
- граф является многодольным со слоями $A_m = \{a \in A \colon m(a,X^L) = m\}, \quad m = 0,\ldots,L$;

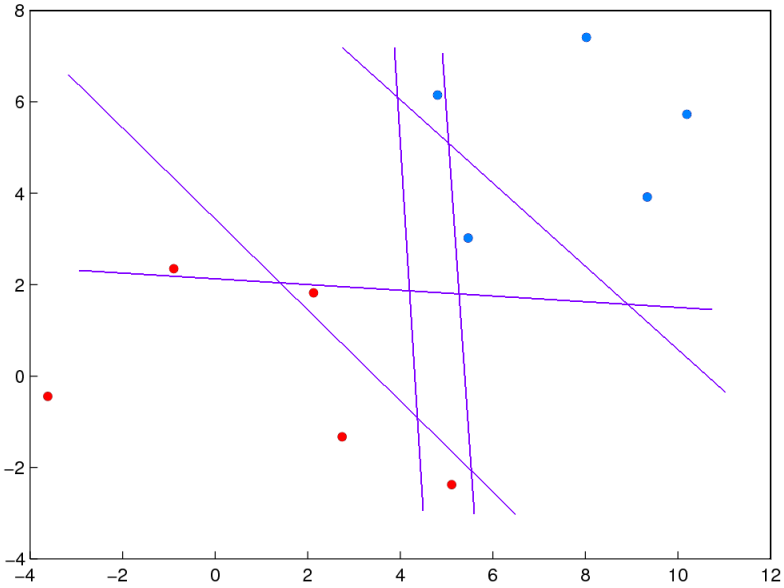
Пример. Семейство линейных алгоритмов классификации

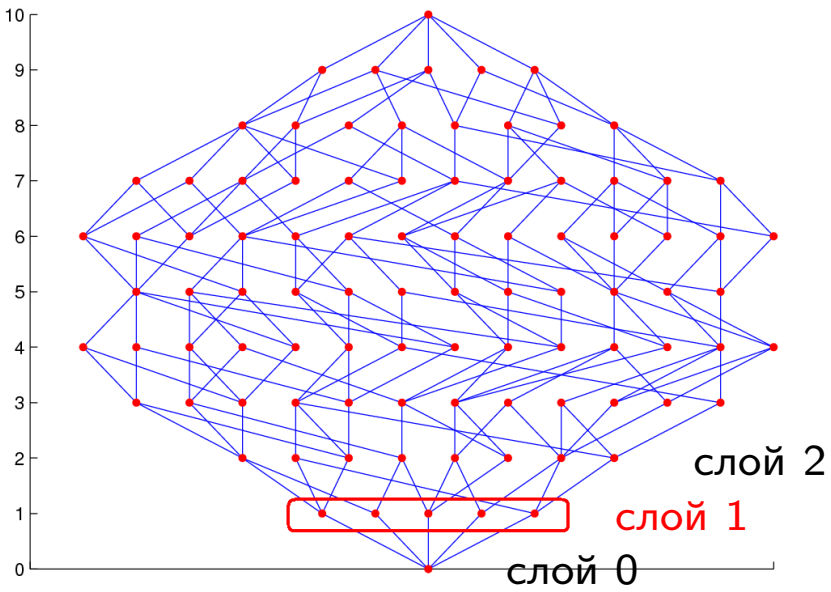




	слой 0
x_1	0
x_2	0
x_3	0
x_4	0
x_5	0
x_6	0
x_7	0
x_8	0
x_9	0
x_{10}	0

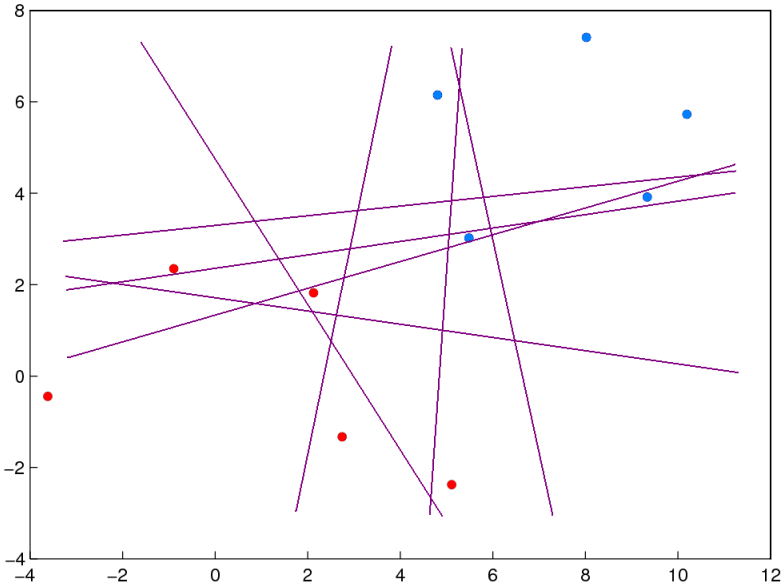
Пример. Семейство линейных алгоритмов классификации

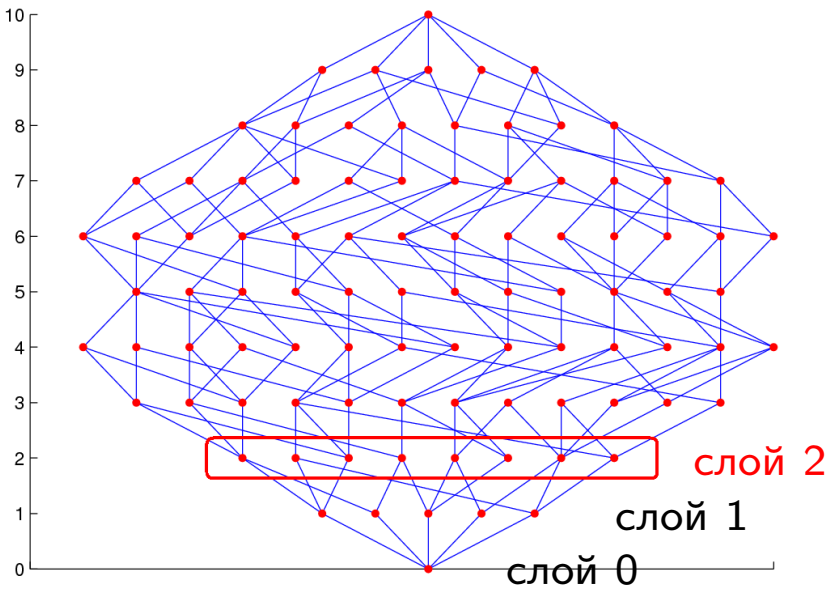




	слой 0	слой 1				
x_1	0	1	0	0	0	0
x_2	0	0	1	0	0	0
x_3	0	0	0	1	0	0
x_4	0	0	0	0	1	0
x_5	0	0	0	0	0	1
x_6	0	0	0	0	0	0
x_7	0	0	0	0	0	0
x_8	0	0	0	0	0	0
x_9	0	0	0	0	0	0
x_{10}	0	0	0	0	0	0

Пример. Семейство линейных алгоритмов классификации





	слой 0	слой 1					слой 2								
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	...

Характеристики расслоения и связности алгоритма

Теорема

Если μ — пессимистичный минимизатор эмпирического риска, то для любого алгоритма a

$$\big[\mu(X){=}a\big] \leqslant \big[X_a \subseteq X\big]\big[X'_a \subseteq \bar{X}\big], \quad \forall X \in X^L,$$

если взять порождающее и запрещающее множества

$$X_a = \big\{x_{ab} \in X^L \;\big|\; a \prec b\big\};$$
$$X'_a = \big\{x \in X^L \;\big|\; \exists b \in A\colon\, b < a,\; I(b,x) < I(a,x)\big\};$$

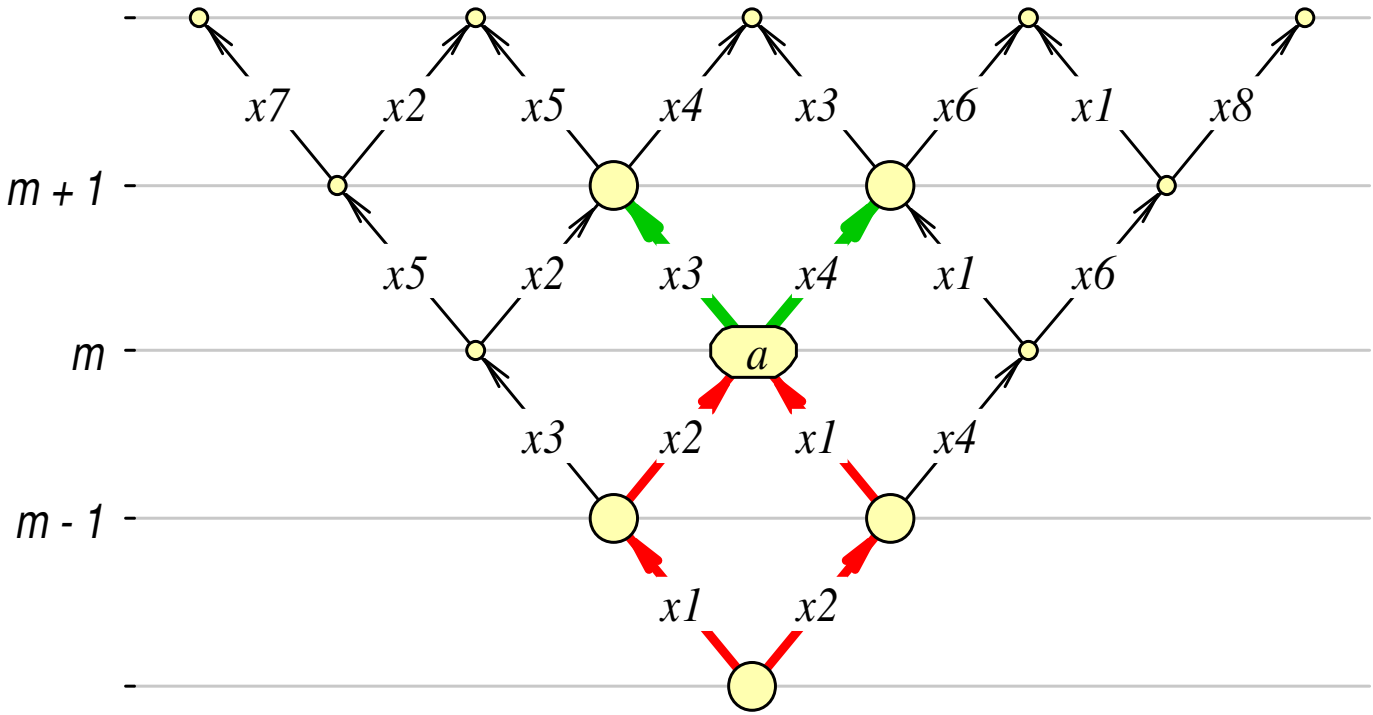
Опр. *Верхняя связность* $u(a) = |X_a|$ алгоритма a
— число всех рёбер, исходящих из вершины a.

Опр. *Неполноценность* $q(a) = |X'_a|$ алгоритма a
— число различных объектов на рёбрах путей, ведущих в a.

Пример: двумерная сеть алгоритмов

Верхняя связность $u(a) = 2$, порождающее $X_a = \{x3, x4\}$

Неполноценность $q(a) = 2$, запрещающее $X'_a = \{x1, x2\}$



Верхняя оценка расслоения–связности

Теорема

Для пессимистичного метода МЭР μ, любых X^L, A и $\varepsilon \in (0,1)$

$$Q_\varepsilon(\mu, X^L) \leqslant \sum_{a \in A} \frac{C_{L-u-q}^{\ell-u}}{C_L^\ell} \mathcal{H}_{L-u-q}^{\ell-u,\, m-q}\left(\tfrac{\ell}{L}\left(m - \varepsilon k\right)\right),$$

где $u = |X_a|$ — верхняя связность алгоритма a,
$q = |X'_a|$ — неполноценность алгоритма a,
$m = n(a, X^L)$ — число ошибок алгоритма a.

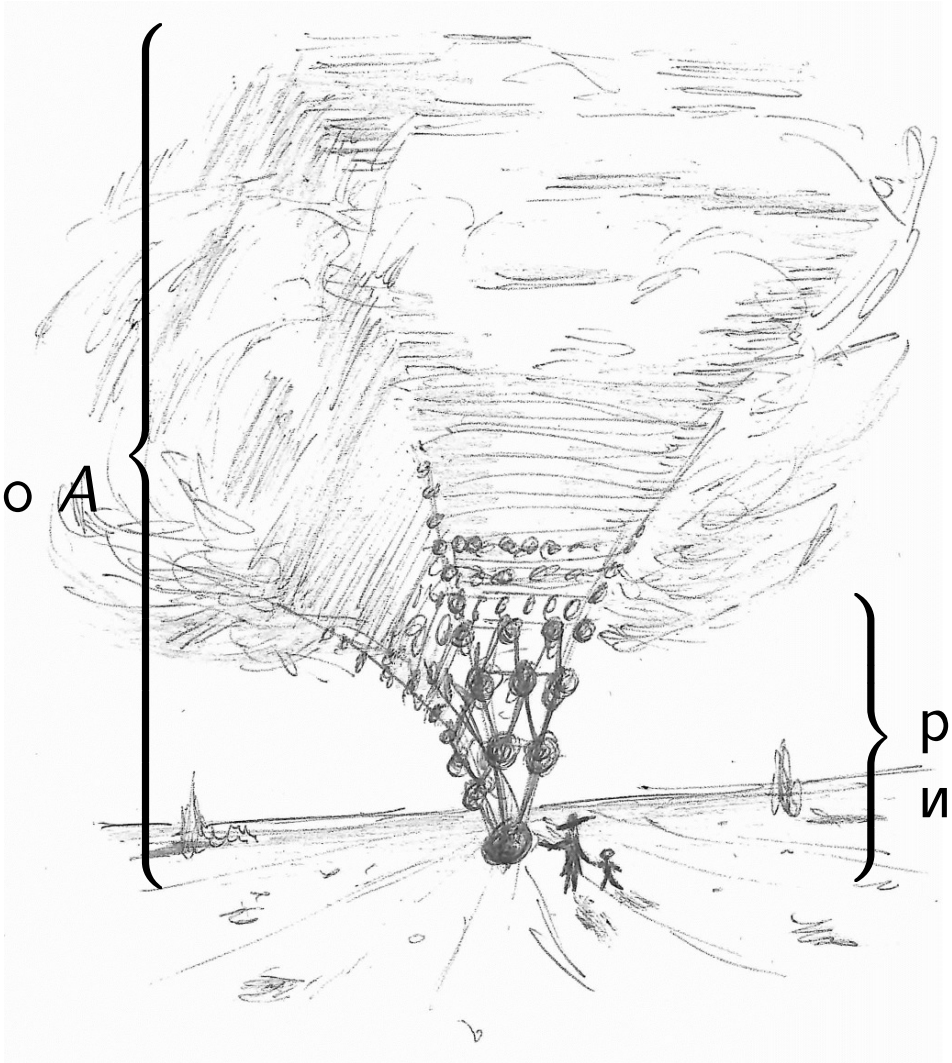
Следствие: $\mathsf{P}\big[\mu(X) = a\big] \leqslant \dfrac{C_{L-u-q}^{\ell-u}}{C_L^\ell}$.

Свойства оценки расслоения–связности

$$Q_\varepsilon \leqslant \sum_{a \in A} \frac{C_{L-u-q}^{\ell-u}}{C_L^\ell} \mathcal{H}_{L-u-q}^{\ell-u,\, m-q}\left(\tfrac{\ell}{L}\left(m - \varepsilon k\right)\right)$$

1. Вклад алгоритма $a \in A$ убывает экспоненциально
   по $u(a) \Rightarrow$ **связные семейства меньше переобучаются**;
   по $q(a) \Rightarrow$ **только нижние слои вносят вклад в Q_ε.**
2. Оценка обращается в равенство в нетривиальных случаях (монотонные цепи и многомерные сети алгоритмов).
3. Если $q(a) > k$, то $P_a = 0$ и вклад алгоритма a равен 0
   $\Rightarrow$ при малых k оценка вырождается.
4. При $|A| = 1$ совпадает с оценкой для одного алгоритма.

Идея использования оценок расслоения–связности



Резюме

- Свойства расслоения и связности уменьшают переобучение.
- На практике семейства, как правило, ими обладают.
  Иначе вероятность переобучения была бы близка к 1
  уже при $|A|$ порядка нескольких десятков.
- Практическое применение комбинаторных оценок:
  1) оценить $\eta = Q_\varepsilon(\mu, X^L)$ по нескольким нижним слоям;
  2) применив обращение, оценить ε через η;
  3) использовать оценку $\nu(X) + \varepsilon$ как критерий выбора модели, метода или отбора признаков.

Цель — лучше понять явление переобучения

- Почему возникает переобучение?
  из-за выбора в условиях неполной информации —
  оптимизируем алгоритм по конечной обучающей выборке
- Всегда ли оно возникает?
  да
- Как оценить величину возможного переобучения?
  1) эмпирически — по кросс-валидации,
  2) теоретические оценки завышены или трудно вычислимы
- Как её уменьшить?
  1) упрощать модель $\to$ уменьшать $|A|$
  2) уточнять модель $\to$ увеличивать расслоение
  3) использовать регуляризации $\to$ увеличивать расслоение
  4) строить непрерывные модели $\to$ увеличивать связность

Алгоритм исследователя

Вход: задача;
Выход: решение;

повторять
    размышлять над задачей самому;
    обсуждать задачу с коллегами;
    делать вычислительные эксперименты;
    пробовать решить задачу в простых частных случаях;
    читать современную научную литературу по этой теме;
пока задача не будет решена;

Воронцов Константин Вячеславович
voron@forecsys.ru

www.MachineLearning.ru • Участник:Vokov

Если что-то было не понятно,
не стесняйтесь подходить и спрашивать :)