Слабая вероятностная аксиоматика, оценки надёжности эмпирических предсказаний, расслоение и различность алгоритмов

Воронцов Константин Вячеславович
vokov@forecsys.ru, http://www.ccas.ru/voron

Вычислительный Центр РАН,
Москва, Вавилова 40, 119991

Интеллектуализация обработки информации,
ИОИ-2008, Крым, Алушта, 9–13 июня 2008

Содержание

Задача оценивания вероятности переобучения

Обучающая (наблюдаемая) выборка: $X^\ell = \{x_i\}_{i=1}^\ell \subset \mathbb{X}$.

Метод обучения μ: $X^\ell \mapsto a$, где $a \in A$ — «алгоритм».

Индикатор ошибки алгоритма a на объекте $x \in \mathbb{X}$:

$I(a,x)$, $I: A \times \mathbb{X} \to \{0,1\}$.

Вектор ошибок алгоритма a на выборке X^ℓ: $\vec{a} = \big(I(a,x_i)\big)_{i=1}^\ell$

Частота ошибок алгоритма a на выборке X^ℓ

$$\nu(a,X^\ell) = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell} I(a,x_i).$$

Контрольная (скрытая) выборка: $X^k = \{x_i\}_{i=1}^k \subset \mathbb{X}$.

Переобученность:

— алгоритма a: $\delta(a,X^\ell,X^k) = \nu\big(a,X^k\big) - \nu\big(a,X^\ell\big)$.

— метода μ: $\delta(\mu,X^\ell,X^k) = \delta(\mu(X^\ell),X^\ell,X^k)$.

Задача: оценить сверху вероятность переобучения

$\mathsf{P}_{X^\ell,X^k}\big\{\delta(\mu,X^\ell,X^k) > \varepsilon\big\} \leqslant \eta(\varepsilon)$, $\eta(\varepsilon)$ — ?

Оценки Вапника-Червоненкиса [1968]

Для любого множества алгоритмов A и любой меры P:

$$\mathsf{P}_{X^L}\Big\{\ \delta(\mu, X^\ell, X^k) > \varepsilon\Big\} \leqslant$$

$$\leqslant \mathsf{P}_{X^L}\Big\{\ \sup_{a\in A} \delta(a, X^\ell, X^k) > \varepsilon\Big\} \leqslant$$

$$\leqslant \sum_a \mathsf{P}_{X^L}\big\{\ \delta(a, X^\ell, X^k) > \varepsilon\big\} \overset{\text{при } \ell = k}{\leqslant} \Delta^A(L)\cdot 1.5\, e^{-\varepsilon^2\ell}.$$

$\Delta^A(L)$ — *функция роста* (shatter coefficient) множества A — максимальное (по всем X^L) число алгоритмов $a \in A$ с попарно различными векторами ошибок $\vec{a} = \big(I(a, x_i)\big)_{i=1}^L$.

$\Delta^A(L) \leqslant 1.5\,\frac{L^h}{h!}$, $h = \mathrm{VCdim}(A)$ — *ёмкость* множества A.

Проблема: эта оценка крайне завышена и почти бесполезна для управления качеством алгоритма.

40 лет спустя: проблема остаётся открытой

- Равномерная сходимость [Вапник, Червоненкис, 1968]
- Theory of learnable (PAC-learning) [Valiant, 1982]
- Concentration inequalities [Talagrand, 1995]
- Connected function classes [Sill, 1995]
- Data-dependent bounds [Haussler, 1992; Bartlett, 1998;...]
- Self-bounding learning algorithms [Freund, 1998]
- PAC-Bayes bounds [McAllester, 1999; Langford, 2005]
- Microchoice bounds [Langford, Blum, 2001]
- Algorithmic luckiness [Herbrich, Williamson, 2002]
- Shell bounds [Langford, 2002]

John Langford. Quantitatively Tight Sample Complexity Bounds. PhD (Carnegie Mellon). 2002.

Причины завышенности: текущее понимание

- Это оценка «наихудшего случая»:
  - не учтены свойства выборки X^L и метода обучения μ;
  - не учтена априорная информация о задаче.
- Это «union bound» $P(S_1 \cup \cdots \cup S_\Delta) \leqslant P(S_1) + \cdots + P(S_\Delta)$, где события есть $S_d = \{\delta(a_d, X^\ell, X^k) > \varepsilon\}$:
  - не учтено сходство алгоритмов.
- Не учтён *эффект локализации*: в каждой задаче «работает» только своя небольшая часть семейства.
- Экспоненциальный множитель $e^{-\varepsilon^2 \ell}$ завышен.
- **Цель:** сравнить причины завышенности количественно.
- **Конечная цель:** радикально улучшить оценку.
- **Проблема:** Вероятностная техника вывода оценок не позволяет контролировать их точность на каждом шаге.

Слабая вероятностная аксиоматика

1. $X^L = \{x_i\}_{i=1}^L$ — конечная неслучайная выборка объектов.
2. Все разбиения $X^L = X_n^\ell \cup X_n^k$, $n = 1, \ldots, N$, $N = C_L^k$, имеют равные шансы реализоваться, $L = \ell + k$.
   подвыборка X_n^ℓ — наблюдаемая;
   подвыборка X_n^k — скрытая.

Переобученность при n-м разбиении: $\delta_n(\mu) \equiv \delta(\mu, X_n^\ell, X_n^k)$.

Вероятность определяется как *доля разбиений*:

$$\mathsf{P}_n\{\delta_n(\mu) > \varepsilon\} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}[\delta_n(\mu) > \varepsilon].$$

Замечание: понятие вероятности вводится
без теории меры и без предельного перехода $L \to \infty$.

Преимущества слабой аксиоматики

- Не избыточна, не асимптотична.
- Допускает измерение вероятностей методом Монте-Карло (скользящий контроль):

$$\hat{\mathsf{P}}_n\{\delta_n > \varepsilon\} = \frac{1}{|N'|}\sum_{n\in N'}[\delta_n > \varepsilon] \overset{N'\to N}{\to} \mathsf{P}_n\{\delta_n > \varepsilon\}.$$

- Позволяет (если надо) вернуться к сильной аксиоматике:
  если $\mathsf{P}_n\{\phi(X_n^\ell, X_n^k)\} \leqslant \eta(\varepsilon, X^L)$,
  то $\mathsf{P}_{X^L}\{\phi(X^\ell, X^k)\} \leqslant \mathsf{E}_{X^L}\eta(\varepsilon, X^L)$.
- Достаточна для доказательства фундаментальных фактов:
  - закон больших чисел: точная оценка скорости сходимости;
  - критерий Смирнова: точная оценка скорости сходимости;
  - многие непараметрические критерии;
  - оценки обобщающей способности (Вапника-Червоненкиса).

Открытый вопрос: какую часть математической статистики можно воспроизвести в рамках слабой аксиоматики?

Закон больших чисел в слабой аксиоматике

Пусть задан фиксированный алгоритм, $\nu(a, X^L) = m/L$.

Теорема (скорость сходимости частот в двух выборках)

Справедлива точная оценка

$$\mathsf{P}_n\left\{\delta(a, X_n^\ell, X_n^k) \geqslant \varepsilon\right\} = H_L^{\ell,m}\left(s(\varepsilon)\right),$$

где $s(\varepsilon) = \left\lfloor \frac{\ell}{L}(m - \varepsilon k) \right\rfloor$;

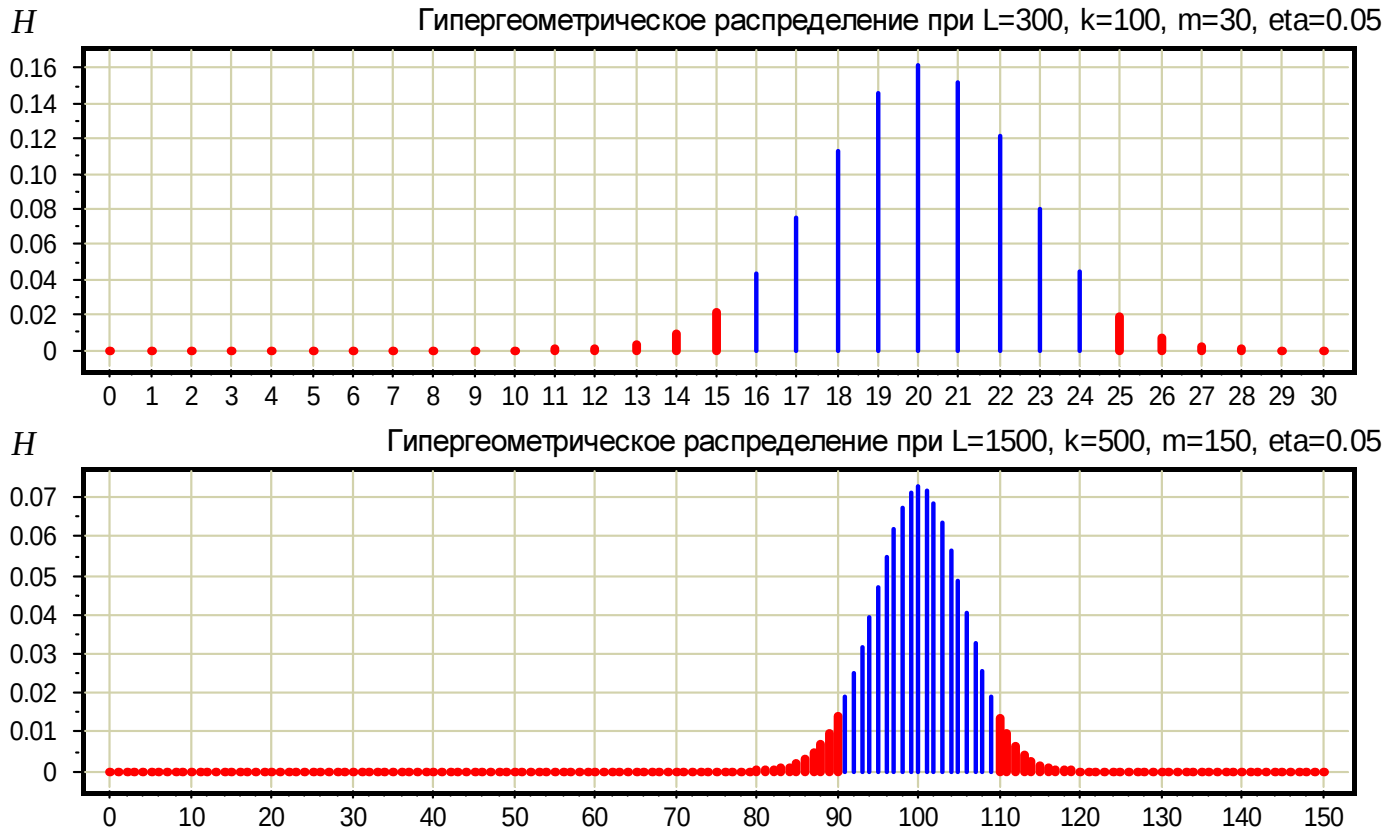
$H_L^{\ell,m}(s) = \sum\limits_{t=s_0}^{s} \frac{C_m^t C_{L-m}^{\ell-t}}{C_L^\ell}$ *— левый хвост гипергеометрического распределения,*

$s_0 = \max\{0, m - k\}$

Для получения численно точных оценок надо отказаться от использования верхних аппроксимаций г.г.р.

Закон больших чисел в слабой аксиоматике

Хвосты гипергеометрического распределения $H_L^{\ell,m}(s(\varepsilon))$:



Оценки Вапника-Червоненкиса в слабой аксиоматике

Для любого метода μ и любой выборки X^ℓ:

$$Q_\varepsilon = \mathsf{P}_n\{\delta(a_n, X_n^\ell, X_n^k) > \varepsilon\} \leqslant$$
$$\leqslant \sum_{m=1}^{L} D_m \cdot H_L^{\ell,m}(s(\varepsilon)) \leqslant$$
$$\leqslant \Delta_L^\ell \cdot \max_m H_L^{\ell,m}(s(\varepsilon)) \overset{\text{при } \ell = k}{\leqslant} \Delta^A(L) \cdot 1.5\, e^{-\varepsilon^2 \ell};$$

$\Delta_L^\ell(\mu, X^L)$ — *локальный коэффициент разнообразия* (ЛКР, local shatter coefficient) множества алгоритмов
$\{a_n = \mu(X_n^\ell) \mid n = 1, \ldots, N\}$;

$D_m(\mu, X^L)$, $m = 0, \ldots, L$ — *профиль разнообразия* — ЛКР множества алгоритмов, допускающих m ошибок на X^L:
$\{a_n = \mu(X_n^\ell) \mid \nu(a_n, X^L) = \frac{m}{L},\ n = 1, \ldots, N\}$.

Оценки Вапника-Червоненкиса в слабой аксиоматике

В результате:

- Частично учтён эффект локализации.
- Избавились от экспоненциальной аппроксимации $1.5\,e^{-\varepsilon^2\ell}$.
- Учтено расслоение алгоритмов по числу ошибок m, но:
  — не ясно, как вычислять D_m;
  — не ясно, даст ли это выигрыш.

Идея: измерить факторы завышенности в эксперименте

Определение

Локальный эффективный коэффициент разнообразия (ЛЭКР):

$$\hat{\Delta}_L^\ell(\varepsilon) = \frac{\hat{\mathsf{P}}_n\{\delta(a_n, X_n^\ell, X_n^k) > \varepsilon\}}{H_L^{\ell,m}(s(\varepsilon))} = \frac{\hat{\mathsf{P}}_n\{\delta(a_n, X_n^\ell, X_n^k) > \varepsilon\}}{\hat{\mathsf{P}}_n\{\delta(a, X_n^\ell, X_n^k) > \varepsilon\}}.$$

Факторы завышенности оценок ВЧ

Степень завышенности оценки ВЧ раскладывается в виде:

$$\frac{\Delta^A(L)\cdot\frac{3}{2}\,e^{-\varepsilon^2\ell}}{\hat{Q}_\varepsilon} = \underbrace{\frac{\Delta^A(L)}{\Delta^\ell_L}}_{r_1}\cdot\underbrace{\frac{\Delta^\ell_L}{\hat{\Delta}^\ell_L(\varepsilon)}}_{r_2(\varepsilon)}\cdot\underbrace{\frac{\hat{\Delta}^\ell_L(\varepsilon)\cdot H}{\hat{Q}_\varepsilon}}_{r_3(\varepsilon)}\cdot\underbrace{\frac{\frac{3}{2}\,e^{-\varepsilon^2\ell}}{H}}_{r_4(\varepsilon)}$$

- $r_1 \geqslant 1$: пренебрежение эффектом локализации
- $r_2 \geqslant 1$: пренебрежение сходством алгоритмов («union bound» для выделения D_m как сомножителей)
- $r_3 \geqslant 1$: свёртка профиля разнообразия
- $r_4 \geqslant 1$: экспоненциальная аппроксимация гипергеометрического распределения $H = \max\limits_m H^{\ell,m}_L\left(s(\varepsilon)\right)$

Логические алгоритмы классификации

- *Закономерность* (правило) — предикат $\phi_y : X \to \{0,1\}$, выделяющий преимущественно объекты класса y.
- *Взвешенное голосование* правил:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{t=1}^{T_y} w_y^t \phi_y^t(x),$$

где $\phi_y^t(x)$ — t-ое правило класса y, w_y^t — вес правила.

- *Метод обучения закономерностей* класса y:
$\mu_y : X^\ell \mapsto \left\{ \phi_y^t(x) \;\middle|\; t = 1, \ldots, T_y \right\}$.

- Логические алгоритмы удобны для этого эксперимента:
  - известна функция роста $\Delta^A(L)$;
  - легко оценить снизу ЛКР $\Delta_L^\ell(\mu, X^L)$;
  - легко оценить ЭЛКР $\hat{\Delta}_L^\ell(\varepsilon)$.

Экспериментальный стенд

- 7 задач классификации из репозитория UCI, $|\mathbb{Y}| = 2$
- 20×2-кратный скользящий контроль, $\ell = k$
- Алгоритм Forecsys ScoringAce® [Кочедыков, Ивахненко,...]

Задача	L	n	C4.5	C5.0	RIPPER	SLIPPER	Forecsys
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 — длина выборки; n — число признаков;

для алгоритмов указан процент ошибок на контроле.

Результаты

Степени завышенности при значении точности ε_0, соответствующей надёжности $\hat{Q}_\varepsilon = 0.05$.

Задача	y	r_1	$r_2(\varepsilon_0)$	$r_3(\varepsilon_0)$	$r_4(\varepsilon_0)$	$\hat{\Delta}^\ell_L[\varepsilon_1, \varepsilon_2]$	$\hat{\Delta}^\ell_L(\varepsilon_0)$
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

- Локальный эффективный коэффициент разнообразия $\hat{\Delta}_L^\ell$ имеет порядок не выше 10^2.
- «Эффективная локальная ёмкость» $\leqslant 1$.
- Оценки сложности Δ такого порядка пока не известны.
- Бессмысленно заниматься оцениванием профиля D_m.
- Основные пути улучшения оценок:
  Локализация $+$ Учёт сходства алгоритмов.

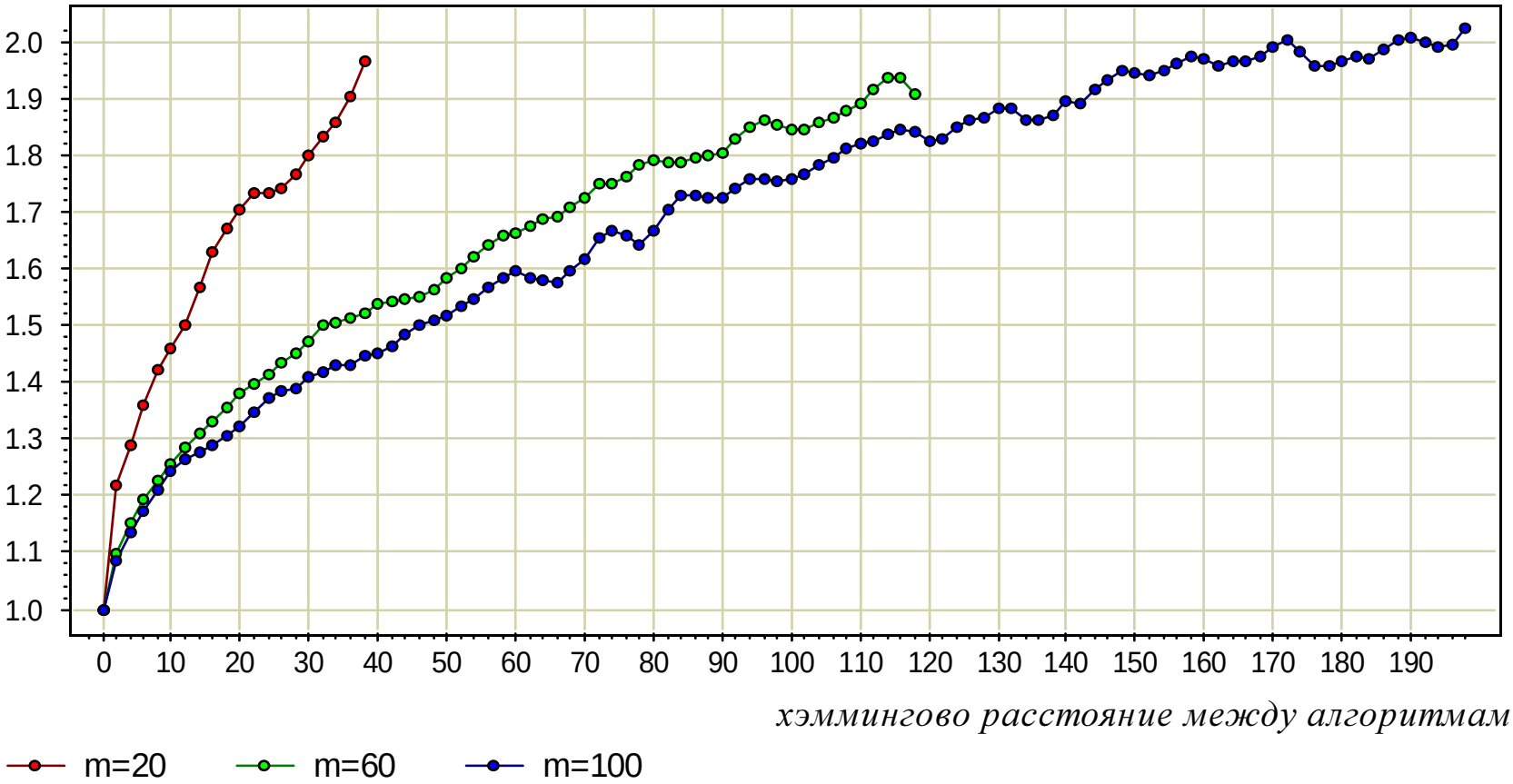
Vorontsov K. V. Combinatorial Probability and Generalization Bounds Tightness // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2008? (в печати).//

Русский «исходник»: www.ccas.ru/voron

Пара алгоритмов

Переобучение при выборе из пары алгоритмов (L=200, k=100)

ЭЛКР (при epsilon=0.05, по N=10000 разбиениям)



При увеличении различности переобучение увеличивается.

Имитационный эксперимент

$D = 1000$ алгоритмов, заданных векторами ошибок;
$\ell = k = 100$ — длина обучения и контроля;
$m = 10$, $m = 50$ — уровень ошибок 5%, 25%;
$\varepsilon = 0.05$ — порог переобученности;
$N' = 1000$ разбиений по методу Монте-Карло.

Генерируется бинарная $L \times D$-матрица векторов ошибок:

Пример:

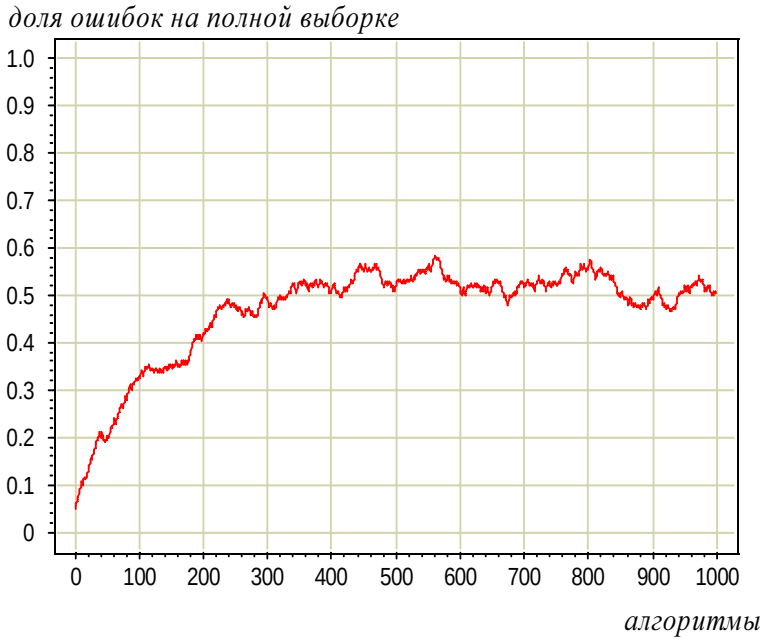
1	1	0	0	0	1	1	1	1	1	1	...
0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	0	...
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	...
0	0	0	1	1	1	1	1	0	0	0	...
0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	...
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	...
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	...
0	1	1	1	1	1	0	0	0	1	1	...
.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	...

Цепочка алгоритмов

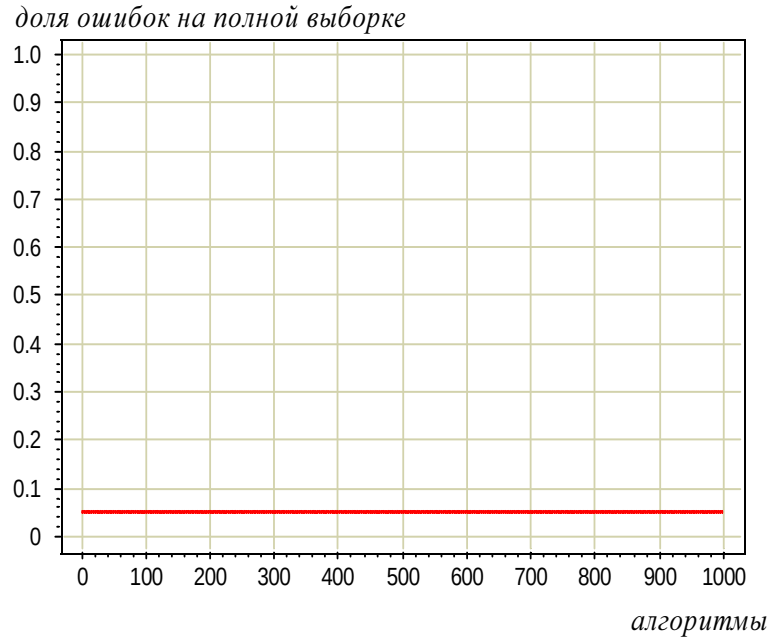
Цепочка — это последовательность векторов ошибок, в которой каждый следующий отличается от предыдущего на 1 объекте.

Два крайних случая цепочек:

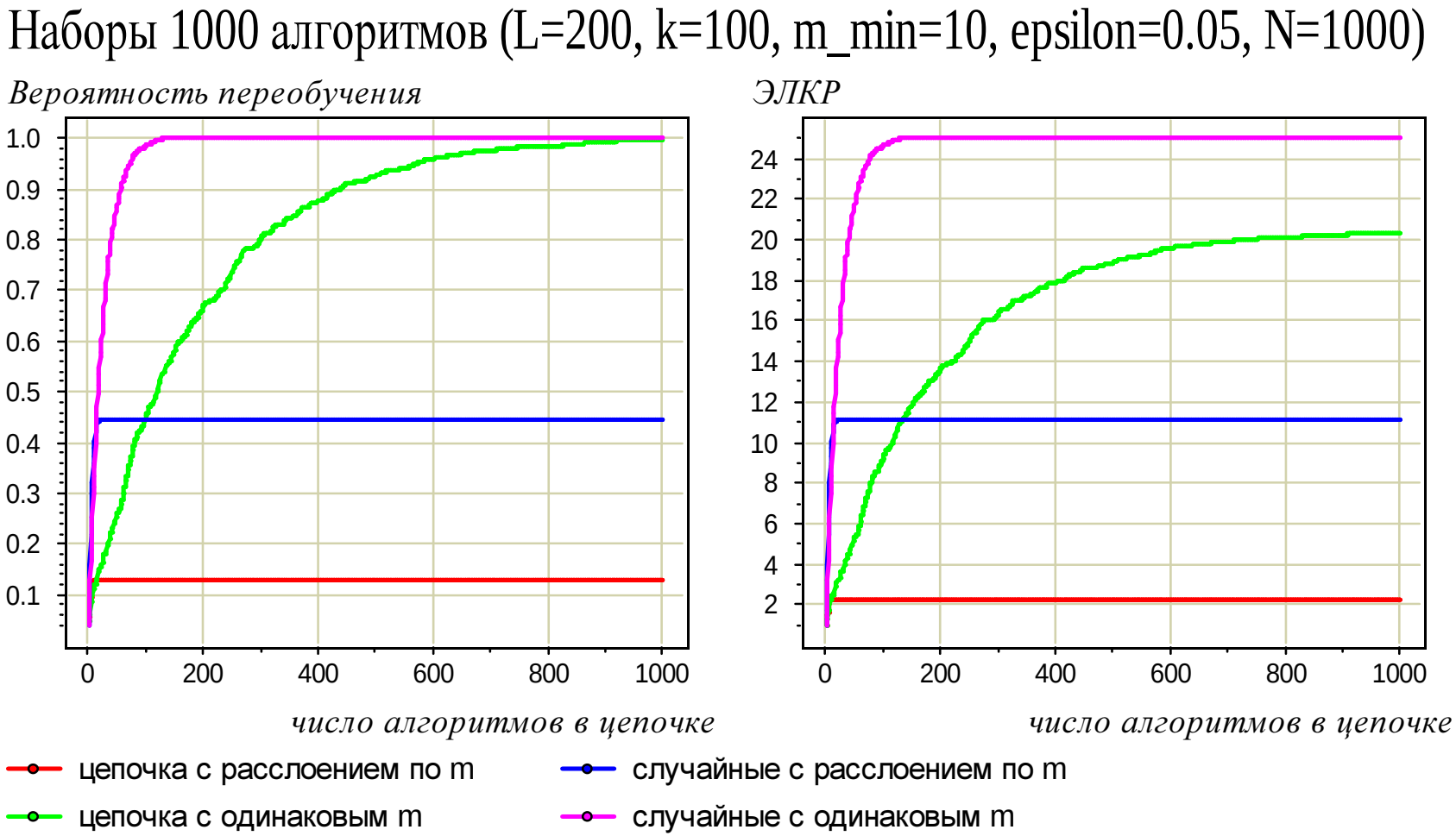
Цепочка 1000 алгоритмов с расслоением по m (L=200, k=100, m_min=10)



Цепочка 1000 алгоритмов с одинаковым m (L=200, k=100, m=10)

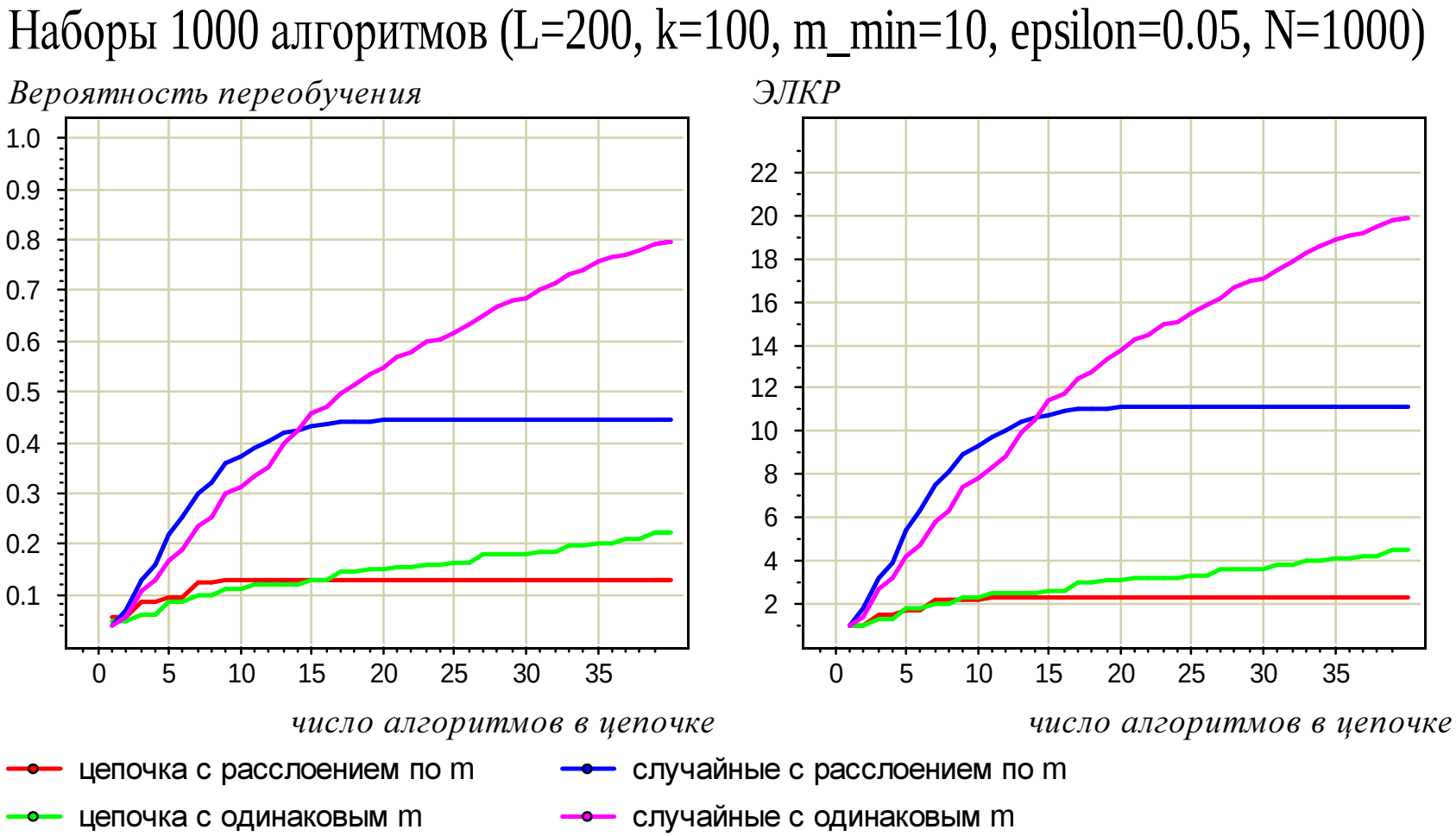


Цепочки и не-цепочки, с расслоением и без (при 5% ошибок)



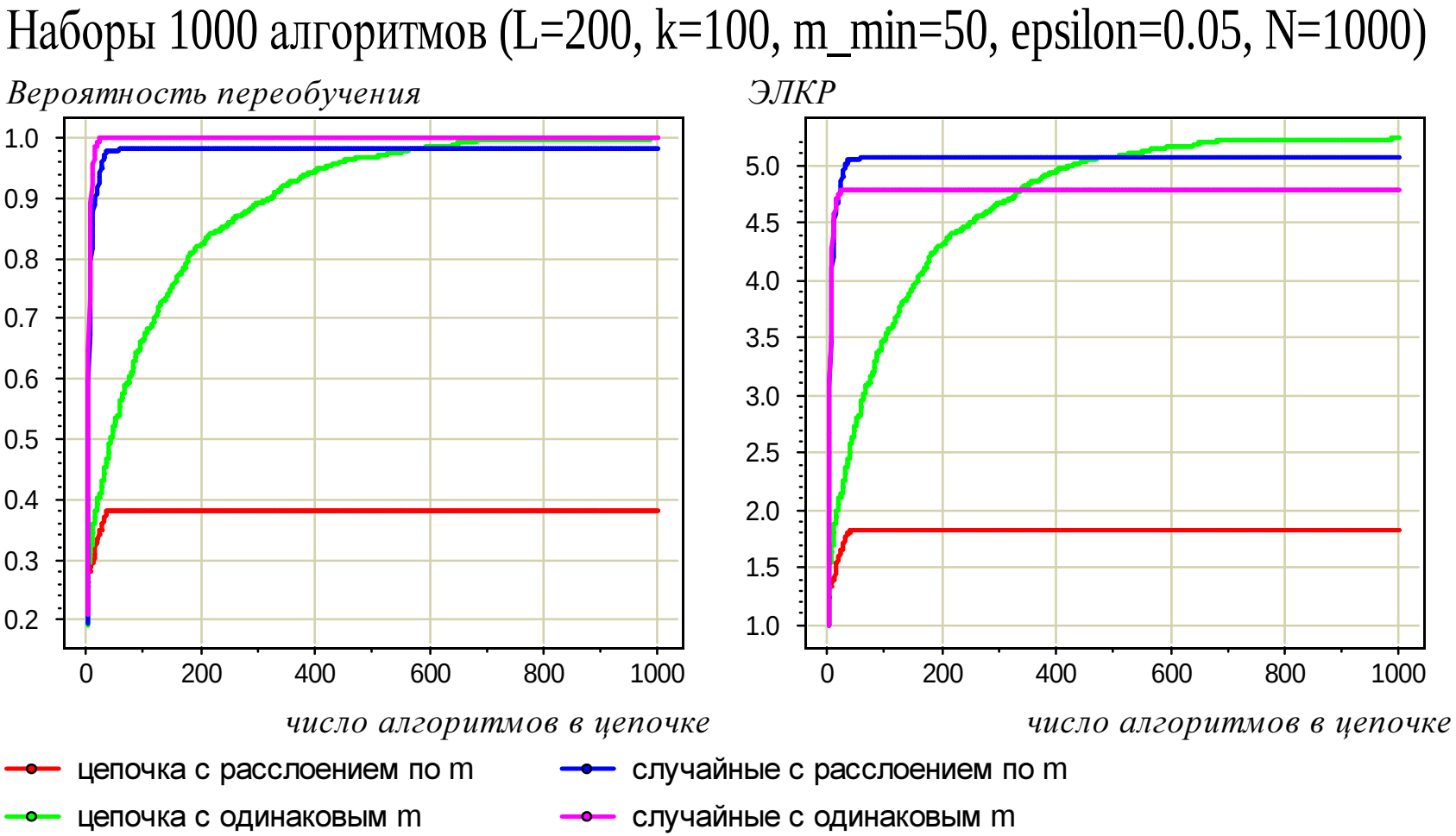
Если расслоение есть, и уровень ошибок мал ($m = 5\%$),
то вероятность переобучения не достигает 1 с ростом D.

Цепочки и не-цепочки, с расслоением и без (5%, увеличено)



По Вапнику $\hat{\Delta}(D) = D$. Это наблюдается только при малых D, и только для случайных векторов ошибок (не-цепочек).

Цепочки и не-цепочки, с расслоением и без (при 25% ошибок)



При увеличении уровня ошибок до $m = 25\%$ только цепочка с расслоением не переобучена.

Выводы

- Переобучение возникает в результате выбора алгоритма (хотя бы из двух!), лучшего на конечной выборке.
- Функционал равномерной сходимости (по Вапнику) не позволяет учесть эффекты расслоения и различности.
- Зависимость $\hat{\Delta}(D)$ всегда «выходит на насыщение» (тогда как по Вапнику $\Delta = D$).
- В цепочках эта зависимость растёт на порядок медленнее.
- В расслоениях эта зависимость «насыщается», не достигая 1.
- При больших D только наличие цепочек и расслоения вместе спасает от сильного переобучения.
- **Есть повод для оптимизма:** в практических задачах как раз есть и цепочки, и расслоения.

Спасибо за внимание!

Спасибо за внимание!

Предлагается открыть *виртуальный семинар*
по вопросам обобщающей способности
на страницах вики-ресурса
www.MachineLearning.ru

Участник:Vokov (К. В. Воронцов)
vokov@forecsys.ru

Презентация и обсуждение вики-ресурса www.MachineLearning.ru

пятница, 13 июня, в конце утреннего заседания ≈ 12:00