Критерии выбора моделей

Г. И. Рудой

Московский физико-технический институт
Факультет управления и прикладной математики
Кафедра интеллектуальных систем
Научный руководитель: В. В. Стрижов

Июнь 2014

Цель работы

- Формулирование и обоснование понятия устойчивости моделей:
  - Критерий выбора моделей.
  - Исследование погрешности в измеряемых данных.

Постановка задачи

$$D = \{\mathbf{x}_i, y_i\} \mid i \in \{1, \dots, \ell\}.$$

$$S(f, D) = \sum_{i=1}^{\ell} (f(\mathbf{x}_i) - y_i)^2 \to \min_{f \in \mathcal{F}}.$$

Требуется: исследовать влияние погрешностей в D на f.

- Случай линейной регрессии:

$$y_i = ax_i + b + \xi_i \mid i \in \{1, \dots, n\}.$$

- Верхние границы ошибок в SVM [Vapnik2000].
- Малые изменения входных данных в сетях глубокого обучения [Szegedy2014].

Устойчивость суперпозиции $f \in \mathcal{F}$:

1. $$\hat{\boldsymbol{\omega}}_f(D) = \arg\min_{\boldsymbol{\omega}_f} S(f(\cdot, \omega_f), D).$$

Устойчивость суперпозиции $f \in \mathcal{F}$:

2.
$$\acute{D}(\Sigma^{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\sigma}^{y}) = \{\mathbf{x}_i + \boldsymbol{\xi}_i^{\mathbf{x}}, y_i + \xi_i^{y} \mid i \in 1, \dots, \ell\}.$$

3.
$$\hat{\boldsymbol{\omega}}_f(\acute{D}(\Sigma^{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\sigma}_y)) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\omega}_f} S(f(\cdot, \boldsymbol{\omega}_f), \acute{D}(\Sigma^{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\sigma}_y)).$$

4.
$$\Delta\hat{\boldsymbol{\omega}}_f(\acute{D}(\Sigma^{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\sigma}_y)) = \hat{\boldsymbol{\omega}}_f(D) - \hat{\boldsymbol{\omega}}_f(\acute{D}(\Sigma^{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\sigma}_y))$$

Устойчивость суперпозиции $f \in \mathcal{F}$:

5. $$\acute{\mathcal{D}}_N(\Sigma^{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\sigma}_y) = \{\acute{D}_1(\Sigma^{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\sigma}_y), \dots, \acute{D}_N(\Sigma^{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\sigma}_y)\}.$$

6. $$\sigma_{\omega_i} = \mathrm{stddev}(\Delta\hat{\boldsymbol{\omega}}_f).$$

7. $$\mathbf{T}_f^N(i, \Sigma^{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\sigma}_y) = \left\{ \frac{\frac{\sigma_{\omega_i}}{\hat{\omega}_i}}{r(\boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{x}}_{\cdot 1}, \mathbf{x}_{\cdot 1})}, \dots, \frac{\frac{\sigma_{\omega_i}}{\hat{\omega}_i}}{r(\boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{x}}_{\cdot |\mathbf{x}|}, \mathbf{x}_{\cdot |\mathbf{x}|})}, \frac{\frac{\sigma_{\omega_i}}{\hat{\omega}_i}}{r(\boldsymbol{\sigma}^{y}, \mathbf{y})} \right\}$$

Теорема (Пифагора)

Пусть выполняется следующее соотношение:

$$\forall i_1, i_2, j : \sigma^{\mathbf{x}}_{i_1 j} = \sigma^{\mathbf{x}}_{i_2 j}.$$

Пусть, кроме того:

$$\forall i_1, i_2 : Cov(\omega_{i_1}, \omega_{i_2}) = 0.$$

Тогда для достаточно малых $\sigma^{\mathbf{x}}_{ij}$ *выполняется следующее соотношение:*

$$\begin{aligned}\{\sigma_{\omega_i}(\boldsymbol{\sigma}_{\cdot 1}, \boldsymbol{\sigma}_{\cdot 2}, \dots, \boldsymbol{\sigma}_{\cdot |\mathbf{x}|})\}^2 &= \{\sigma_{\omega_i}(\boldsymbol{\sigma}_{\cdot 1}, 0, 0, \dots, 0)\}^2 + \\ &+ \{\sigma_{\omega_i}(0, \boldsymbol{\sigma}_{\cdot 2}, 0, \dots, 0)\}^2 + \\ &+ \dots + \\ &+ \{\sigma_{\omega_i}(0, 0, \dots, 0, \boldsymbol{\sigma}_{\cdot |\mathbf{x}|}\}^2.\end{aligned}$$

Дано:

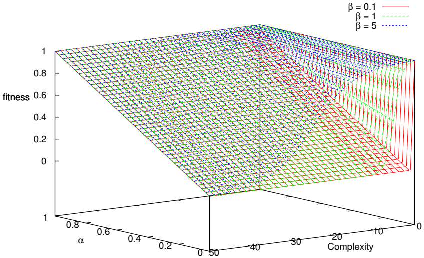
- $D_j = (\lambda_i^j, n_i^j) \mid i \in \{1, \dots, 17\}, j \in \{1, 2\}$.
- Экспертные предположения.

Требуется:

- $n_j = n_j(\lambda)$.
- Оценить адекватность $n_1(\lambda) - n_2(\lambda)$.

$$Q_f = \frac{1}{1 + S_f} \left(\alpha + \frac{1 - \alpha}{1 + \exp(\frac{C(f)}{\beta} - \tau)} \right).$$

- α — влияние штрафа за сложность, $0 \ll \alpha < 1$,
- $\beta > 0$ — строгость штрафа за сложность,
- τ — желаемая сложность модели.



Две модели:

- $n_1(\lambda) = 1.34 + \frac{3.54 \cdot 10^3}{\lambda^2} + \frac{2 \cdot 10^3}{\lambda^4}$.
- $n_2(\lambda) = 1.34 + \frac{11.6}{\lambda} + \frac{17.37}{\lambda^2} + \frac{0.0866}{\lambda^3} + \frac{2.95 \cdot 10^{-4}}{\lambda^4} + \frac{8.54 \cdot 10^{-7}}{\lambda^5}$.

τ	Суперпозиция	MSE	$C(f)$	$Q(f)$
10	n_1	$2.4 \cdot 10^{-8}$	13	0.095
30	n_2	$3.9 \cdot 10^{-9}$	31	0.031

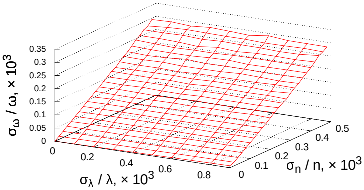
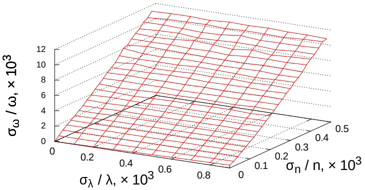
n_1	n_2
	

Таблица: Графики стандартного отклонения первого коэффициента для моделей n_1 и n_2.

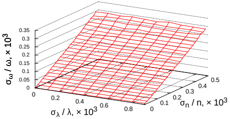
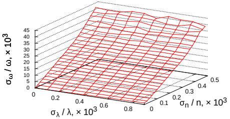
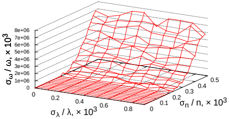
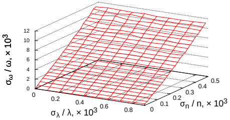
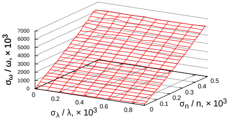
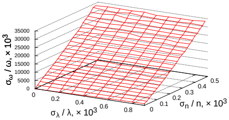
n	ω_1	ω_2	ω_3
1			
2			

Таблица: Графики стандартного отклонения первых трех коэффициентов для моделей n_1 и n_2.

Полимер	ω_1	ω_2	ω_3	MSE
1	1.34946	3558.95	1924.33	$2.2 \cdot 10^{-8}$
2	1.34047	3118.84	1578.59	$1.4 \cdot 10^{-8}$
Разность	$6.71 \cdot 10^{-3}$	$1.41 \cdot 10^{-1}$	$2.2 \cdot 10^{-1}$	

Таблица: Значения коэффициентов для модели n_1 и их относительная разность.

Коэфф.	$(2 \cdot 10^{-4}; 2 \cdot 10^{-5})$	$(6 \cdot 10^{-4}; 6 \cdot 10^{-5})$	$(9 \cdot 10^{-4}; 2 \cdot 10^{-4})$
1	$1.22 \cdot 10^{-5}$	$3.59 \cdot 10^{-5}$	$1.19 \cdot 10^{-4}$
2	$1.48 \cdot 10^{-3}$	$4.38 \cdot 10^{-3}$	$1.44 \cdot 10^{-2}$

Таблица: Значения стандартного отклонения для коэффициентов модели n_1 для первого полимера в зависимости от относительных дисперсий $(\frac{\sigma_\lambda}{\lambda}, \frac{\sigma_{\boldsymbol{n}}}{n})$.

Пусть $E(\xi_i) = 0$; $D(\xi_i) = \sigma^2$, и:

$$y_i = ax_i + b + \xi_i \mid i \in \{1, \ldots, n\}.$$

Перейдем к представлению

$$y_i = a(x_i - \overline{x}) + b + \xi_i \mid i \in \{1, \ldots, n\}.$$

Тогда:

$$D(a) = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2}, \quad D(b) = \frac{\sigma^2}{n}.$$

Рассмотрим:

$$\delta_1 = \frac{|\mathbf{T}_y^N(1) - D(a)|}{D(a)},$$

$$\delta_2 = \frac{|\mathbf{T}_y^N(2) - D(b)|}{D(b)}.$$

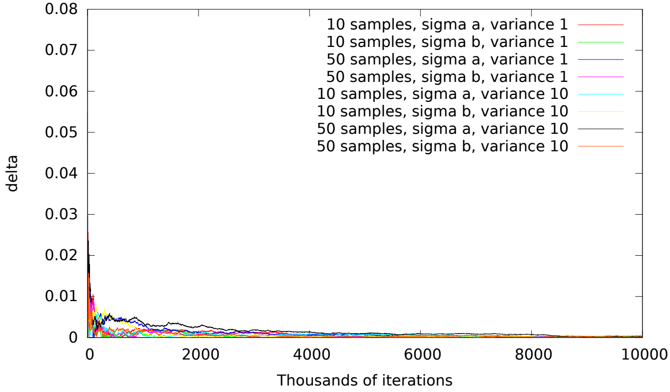


Рис.: График зависимости δ от числа итераций (от 0 до 10^7 итераций).

Сходимость к параметрам для линейной регрессии

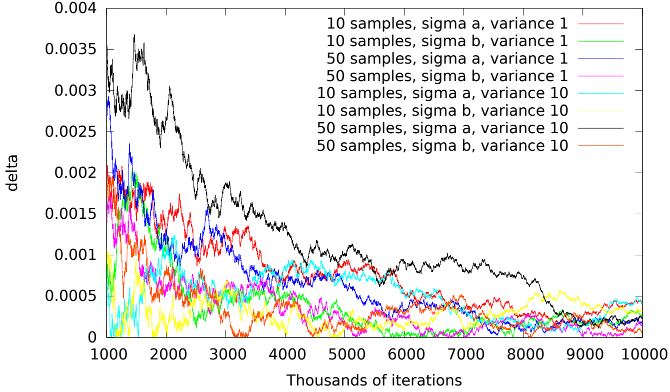


Рис.: График зависимости δ от числа итераций (от 10^6 до 10^7 итераций).

$$L(x) = \prod_{i=0}^{\ell} y_i \prod_{j=0, j \neq i}^{\ell} \frac{x - x_j}{x_i - x_j},$$

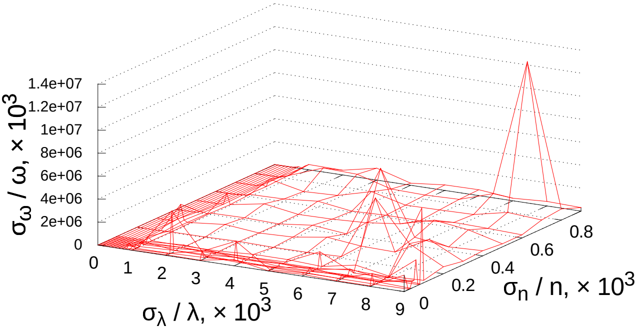


Рис.: Поверхность стандартного отклонения коэффициента ω_0.

Публикации и работы

- Анализ устойчивости существенно нелинейных регрессионных моделей к погрешностям в измеряемых данных — «ЖВММФ» (направлено в журнал).
- О возможности применения методов Монте-Карло в анализе нелинейных регрессионных моделей — «СибЖВМ» (направлено в журнал).
- Доклад на «Труды МФТИ» 2013.
- Доклад на «Ломоносов» 2014.

- Сформулирован новый критерий выбора моделей.
- Обоснована практическая ценность сформулированного критерия.
- Исследованы различные регрессионный модели и связь предложенного критерия с прочими критериями.

Ссылки I

V. Vapnik and O. Chapelle
Bounds on Error Expectation for Support Vector Machines.
Neural Computation, 12(9) : 2013–20036, 2000

C. Szegedy et al.
Intriguing properties of neural networks.
CoRR, 2014