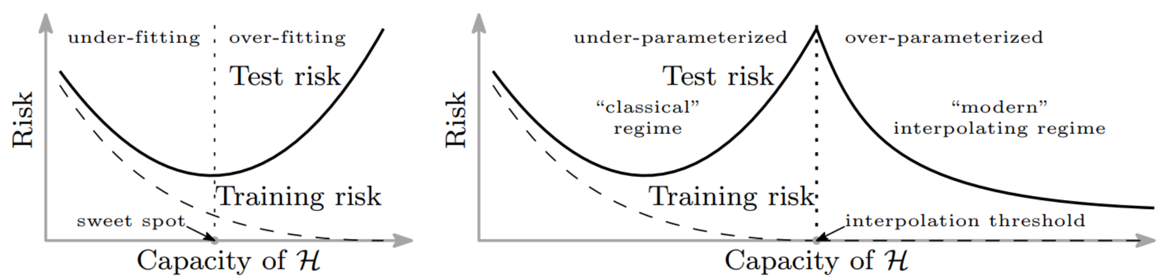
Double Descent Phenomenon

Egy model kapacitásának növelése egy adott pontig csökkenti a teszt hibát, ezt követően a teszt hiba nő, majd az interpolációs küszöbön túl, a hiba ismét elkezd csökkenni.

Schaeffer, Rylan, et al. (2023)

Belkin, Mikhail, et al. (2019)



Jelölés

$\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)\},\ |\mathcal{D}| = N$

$(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$

$f : \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}$

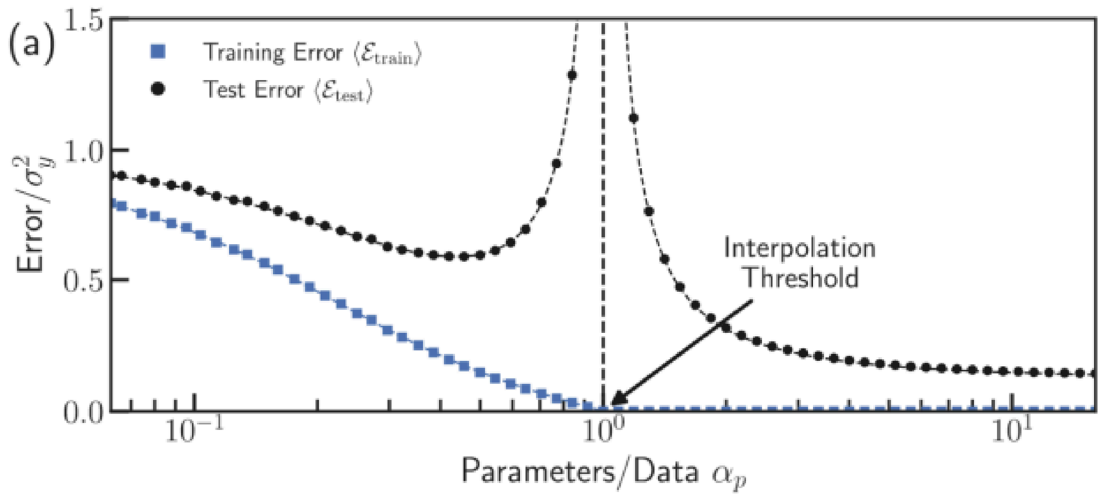
$f \in \mathcal{H}$ függvény család

Classical Bias-Variance trade-off

1. Ha $\mathcal{H}$ kapacitása kicsi (*high bias*), akkor minden $f \in \mathcal{H}$ nem illeszkedik megfelelő mértékben a tanulási adatokra (*under-fitting*), ezért új adatokra is rossz eredményeket fog adni.
2. Ha $\mathcal{H}$ kapacitása nagy (*high variance*), akkor léteznek $f \in \mathcal{H}$ amelyek tökéletesen illeszkednek a tanulási adatokra (*over-fitting*), viszont nem képesek általánosítani, ezért új adatokra rossz eredméyeket fognak adni.

Ezek alapján $\mathcal{H}$-t úgy kell kiválasztani, hogy a kapacitása a *sweet spot*-ban legyen

"Modern" Interpolating Regime



Ha $\mathcal{H}$ kapacitását növeljük, az interpolációs küszöbön túl , a tanulási hiba 0 marad, viszont a test hiba ismét elkezd csökkenni. Ez ellentmond a bias-variance trade-off elvnek.

Egyszeűsített intuitív magyarázat. Az interpolációs küszöbön 1 függvény létezik, ami képes tökéletesen illeszkedni a tanulási adatokra, annak a valószínűsége, hogy ez a függvény új adatokra is illeszkedni fog eléggé alacsony. Az interpolációs küszöbön túl, több függvény fog tökéletesen illeszkedni az adatokra, tehát annak a valószínűsége, hogy létezik ezek között legalább egy olyan amely új adatokra is megfelő predikciókat ad, nagyobb.

Vizuális Intuició Polinomiális Regresszióval

$y : \mathcal{R} \mapsto \mathcal{R}$

$y(x) = 2x + cos(25x)$

$\phi_P : \mathcal{R} \mapsto \mathcal{R}^P$

$$\phi_P(x) = \begin{bmatrix} \phi_1(x) \\ \phi_2(x) \\ \vdots \\ \phi_P(x) \end{bmatrix}$$

$y \approx \phi_P(x) \cdot \Theta_P$

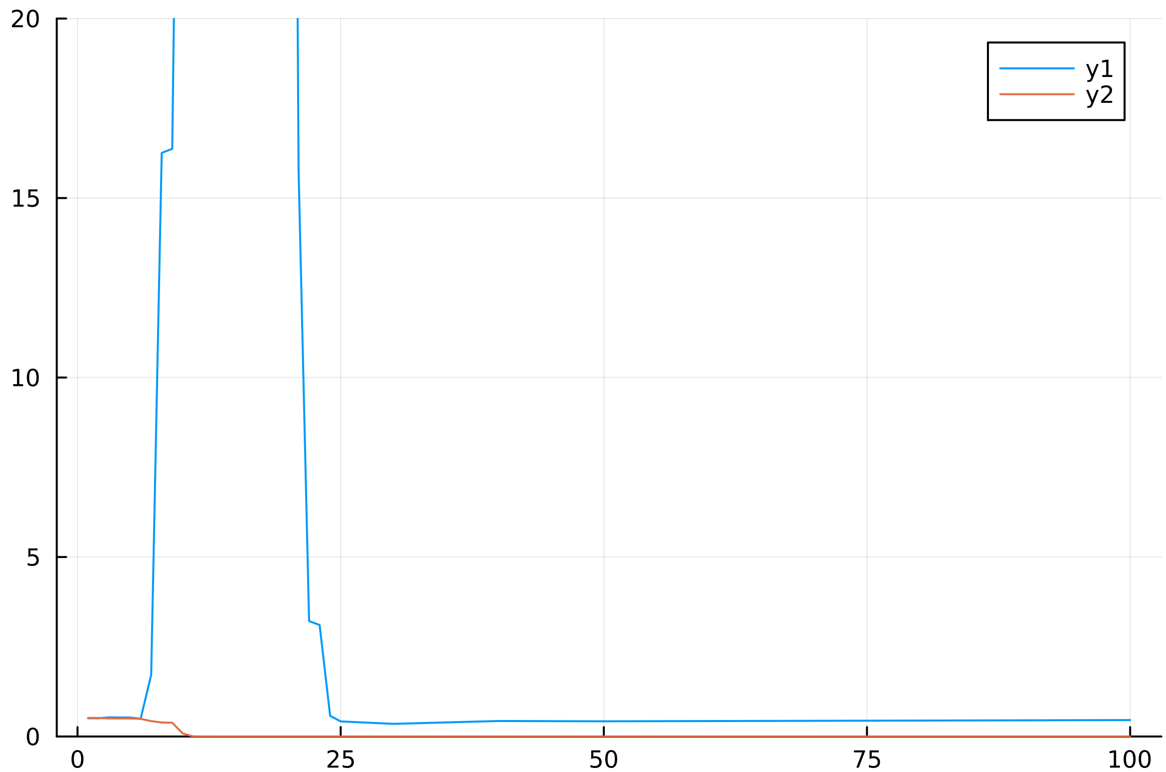
In [9]:
```
using Plots, Random, SpecialPolynomials, Statistics
```

In [84]:
```
N = 15
P = [1:25..., 30, 40, 50, 100]

f(x) = 2 .* x + cos.(x .* 25)
low = -1
high = 1

X_train = rand(N) .* (high - low) .+ low
```

```julia
Y_train = f(X_train)
X_test = collect(range(low, high, length=1000))
Y_test = f(X_test)
;
```

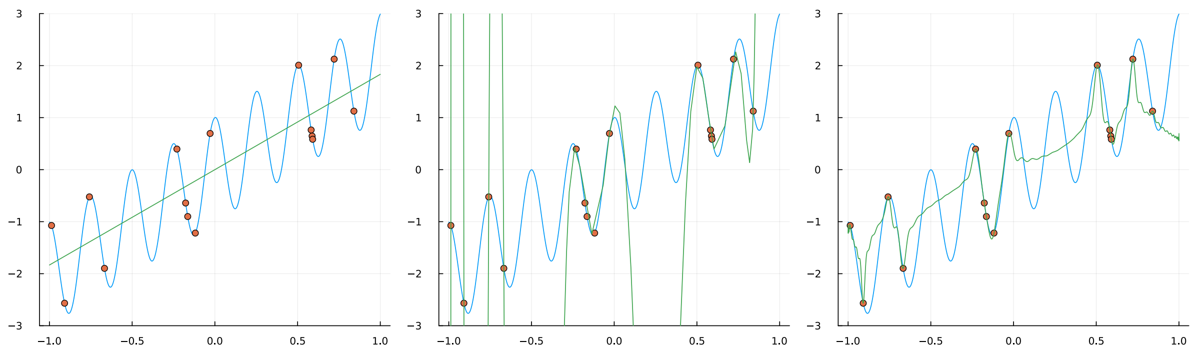
In [86]:

```julia
train_mse = []
test_mse = []
models = []

# Feature Function Factory
Φ(n) = (x) -> x .|> basis.(Legendre, 1:n)

model(Φ::Function, Θ::Vector{Float64}) = (x) -> Φ(x)' * Θ

mse(ground, pred) = mean((ground .- pred) .^ 2)

for p ∈ P
    Φₚ = Φ(p)
    X_train_features = reduce(hcat, Φₚ.(X_train))'
    X_test_features = reduce(hcat, Φₚ.(X_test))'
    Θ = X_train_features \ Y_train

    Y_train_pred = X_train_features * Θ
    Y_test_pred = X_test_features * Θ

    push!(models, model(Φₚ, Θ))
    push!(train_mse, mse(Y_train, Y_train_pred))
    push!(test_mse, mse(Y_test, Y_test_pred))
end

p = plot(P, test_mse, ylims=(0, 20))
plot(p, P, train_mse)
```



In [102…

```
p = plot(X_test, Y_test, layout=(1,3), legends=false, size=(1400, 400))
plot!(p[2], X_test, Y_test, legends=false)
plot!(p[3], X_test, Y_test, legends=false)

scatter!(p[1], X_train, Y_train)
scatter!(p[2], X_train, Y_train)
scatter!(p[3], X_train, Y_train)

plot!(p[1], models[1], ylims=(-3, 3))
plot!(p[2], models[15], ylims=(-3, 3))
plot!(p[3], models[29], ylims=(-3, 3))
```



Matematikai Intuició Lineáris Regresszióval

$Y = X \cdot \Theta$

Lineáris regresszió esetében $P = D$. Mivel a paraméterek száma nem növelhető, az adatok számát fogjuk csökkenteni.

1. Ha $P < N$

   $\hat{\Theta}_{under} = \underset{\Theta}{argmin} ||X\Theta - Y||^2$

   Megoldás: $\hat{\Theta}_{under} = (X^T X)^{-1} X^T Y$

2. Ha $P > N$

   $\hat{\Theta}_{over} = \underset{\Theta}{argmin} ||\Theta||^2, \ \forall n \in \{1, \ldots, N\} \ x_n \cdot \Theta = y_n$

   Megoldás: $\hat{\Theta}_{over} = X^T (X X^T)^{-1} Y$

$\hat{y}_{test,under} = x_{test} \cdot \hat{\Theta}_{under} = x_{test} \cdot (X^T X)^{-1} X^T Y$

$\hat{y}_{test,over} = x_{test} \cdot \hat{\Theta}_{over} = x_{test} \cdot X^T (X X^T)^{-1} Y$

Jelöljük Θ^*-al az ismeretlen ideális paramétereket amikre minimális a teszt hiba

Tehát $Y = X\Theta^* + E$, ahol E az adat megtanulhatatlan része

Ezt használva írjuk át a predikciót a két esetben

1. P < N

   $\hat{y}_{test,under} = x_{test} \cdot (X^T X)^{-1} X^T Y$

   $= x_{test} \cdot (X^T X)^{-1} X^T (X\Theta^* + E)$

   $= x_{test} \cdot (X^T X)^{-1} X^T X\Theta^* + x_{test} \cdot (X^T X)^{-1} X^T E$

   $= x_{test} \cdot \Theta^* + x_{test} \cdot (X^T X)^{-1} X^T E$

   $x_{test} \cdot \Theta^* \stackrel{def}{=} y^*_{test}$

   $\hat{y}_{test,under} - y^*_{test} = x_{test} \cdot (X^T X)^{-1} X^T E$

   $(X^T X)^{-1} X^T = X^+ = V\Sigma^+ U^T$

   $\hat{y}_{test,under} - y^*_{test} = x_{test} \cdot V\Sigma^+ U^T E = \sum_{r=1}^{R} \frac{1}{\sigma_r}(x_{test} \cdot v_r)(u_r \cdot E)$

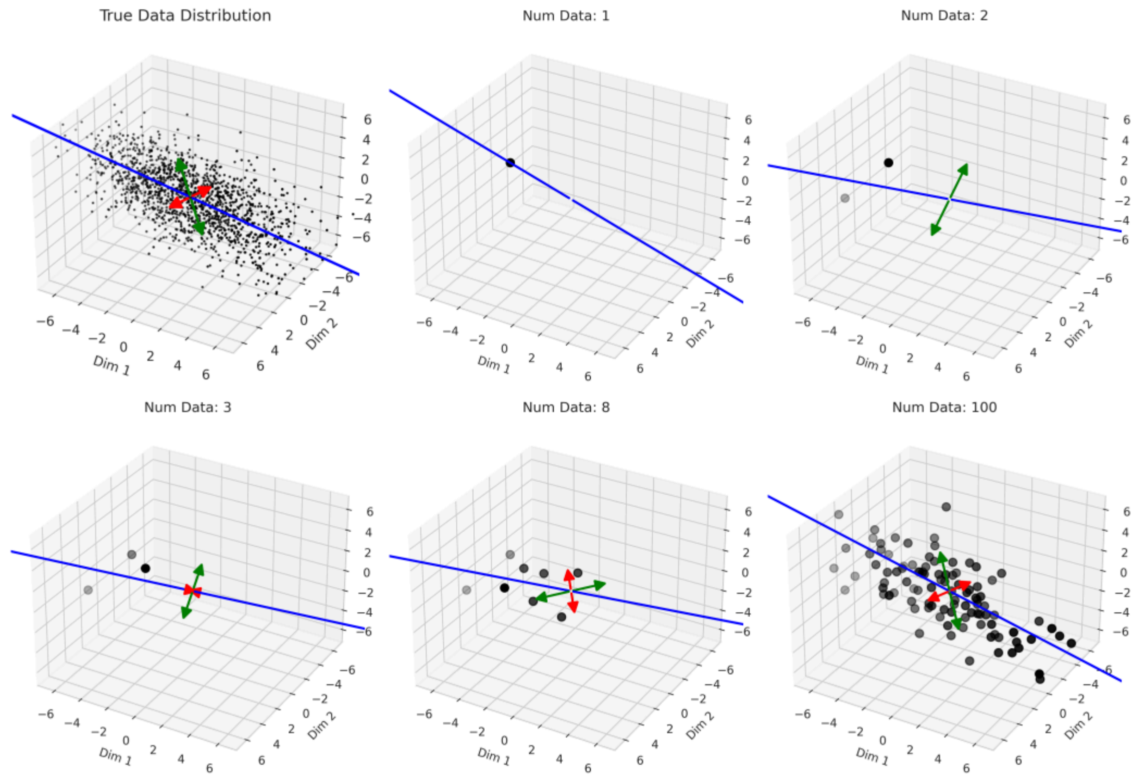
2. P > N, a számítás hasonló (exercise for the reader)

   $\hat{y}_{test,over} - y^*_{test} = \sum_{r=1}^{R} \frac{1}{\sigma_r}(x_{test} \cdot v_r)(u_r \cdot E) + x_{test} \cdot (X^T (XX^T)^{-1} X - I_d)\Theta^*$

A két egyenlet arra mutat, hogy a teszt hibát 3 érték fog meghatározni:

1. Mennyire változnak a tanulási adatok minden irányban: $\frac{1}{\sigma_r}$
2. Mennyire és milyen irányokban változnak a teszt adatok relatív a tanulási adatokhoz képest: $x_{test} \cdot v_r$
3. Mennyire képes az ideális modell megtanulni a tanulási adatokat: $u_r \cdot E$

Miért a legnagyobb a hiba az interpolációs küszöbön?



Mikor nem történik Double Descent?

- Nincsenek nullához közeli szinguláris értékek (σ_r)
- A teszt adatok nem változnak más irányokban mint a tanulási adatok
- Az ideális model tökéletes illeszkedik a tanulási adathalmazra (E=0)