

NONPARAMETRIC REGRESSION USING DEEP NEURAL NETWORKS WITH RELU ACTIVATION FUNCTION

Prof. Schmidt-Hieber (2020)

Literatur

Schmidt-Hieber, Johannes (Aug. 2020). "Nonparametric regression using deep neural networks with ReLU activation function". In: *Annals of Statistics* 48.4, S. 1875–1897. ISSN: 0090-5364. DOI: 10.1214/19-aos1875. URL: <http://dx.doi.org/10.1214/19-AOS1875>.

1 Modell

Beobachte n i.i.d. Datenpunkte aus dem nichtparametrisches multivariaten Regressionsmodell

$$Y_i = f_0(\mathbf{X}_i) + \varepsilon_i \quad i = 1, \dots, n \quad (1)$$

- $Y_i \in \mathbb{R}$, $\mathbf{X}_i \in [0, 1]^d$ zufällig
- $\varepsilon_i \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} \mathcal{N}(0, 1)$ unabhängig von den $(\mathbf{X}_i)_i$

Ziel: Rekonstruktion der unbekannten Funktion $f_0 : [0, 1]^d \rightarrow \mathbb{R}$ anhand der Daten $(\mathbf{X}_i, Y_i)_i$.

2 Notation

- Vektoren werden dick gedruckt \mathbf{X}_i
- $|\mathbf{x}|_p = (\sum_i |x_i|^p)^{1/p}$
- $|\mathbf{x}|_\infty = \max_{i=1, \dots, d} |x_i|$
- $|\mathbf{x}|_0 = \sum_i \mathbf{1}(x_i \neq 0)$

3 Neuronale Netzwerke

- Rectified Linear Unit (ReLU) als *Aktivierungsfunktion*:

$$\sigma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \quad \sigma(x) := \max(0, x)$$

- Für $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^r$ verschobene *Aktivierungsfunktion*:

$$\sigma_{\mathbf{v}} : \mathbb{R}^r \rightarrow \mathbb{R}^r \quad \sigma_{\mathbf{v}}\left(\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_r \end{pmatrix}\right) := \begin{pmatrix} \sigma(y_1 - v_1) \\ \vdots \\ \sigma(y_r - v_r) \end{pmatrix}$$

- Ein Tupel (L, \mathbf{p}) mit einer *Tiefe* $L \in \mathbb{N}_0$ und *Breitenvektor* $\mathbf{p} = (p_0, \dots, p_{L+1}) \in \mathbb{N}^{L+2}$ heißt *Netzwerk Architektur*.
- Eine Funktion $f : \mathbb{R}^{p_0} \rightarrow \mathbb{R}^{p_{L+1}}$ heißt *Neuronales Netzwerk* mit Netzwerk Architektur (L, \mathbf{p}) , wenn *Gewichtsmatrizen* $W_i \in \mathbb{R}^{p_{i+1} \times p_i}$ ($i = 0, \dots, L$) und *Verschiebungsvektoren* $\mathbf{v}_i \in \mathbb{R}^{p_i}$ ($i = 1, \dots, L$) existieren, sodass für f gilt

$$f(\mathbf{x}) := W_L \sigma_{v_L} W_{L-1} \sigma_{v_{L-1}} \dots W_1 \sigma_{v_1} W_0 \mathbf{x} \quad (2)$$

Die Gewichtsmatrizen W_i und Verschiebungsvektoren v_i heißen *Parameter* des Neuronalen Netzwerkes.

- $\mathcal{F}(L, \mathbf{p}) := \left\{ f \text{ von Gestalt (2)} : \max_{j=0, \dots, L} \|W_j\|_\infty \vee |\mathbf{v}_j|_\infty \leq 1 \right\}$
- $\mathcal{F}(L, \mathbf{p}, s, F) := \left\{ f \in \mathcal{F}(L, \mathbf{p}) : \sum_{j=0}^L \|W_j\|_0 + |v_j|_0 \leq s, \|f\|_\infty \leq F \right\}$

Im Folgende bezeichne \hat{f}_n ein Schätzer für die Regressionsfunktion f_0 , welcher stets eine Funktion aus der Klasse $\mathcal{F}(L, \mathbf{p}, s, F)$ liefert

- $\Delta_n(\hat{f}_n, f_0) := \mathbb{E}_{f_0} \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{f}_n(\mathbf{X}_i))^2 - \inf_{f \in \mathcal{F}(L, \mathbf{p}, s, F)} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - f(\mathbf{X}_i))^2 \right]$
- \hat{f}_n^{ERM} mit $\Delta_n(\hat{f}_n^{\text{ERM}}, f_0) = 0$ heißt *Empirical Risk Minimizer*

- *Prediction error*

$$R(\hat{f}_n, f_0) = \mathbb{E}_{f_0}[(\hat{f}_n(\mathbf{X}) - f_0(\mathbf{X}))^2]$$

mit $\mathbf{X} \stackrel{D}{=} \mathbf{X}_i$ unabhängig von den Daten $(\mathbf{X}_i, Y_i)_i$

4 Annahmen

4.1 Klassische Nichtparametrische Statistik

- *Annahme:* f_0 ist β -glatt
- *Minimax-Rate* für Prediction error $R(\hat{f}_n, f_0)$: $n^{\frac{-2\beta}{2\beta+d}}$
- **Problem:** d kann sehr groß werden \implies *Curse of Dimensionality*

4.2 Annahmen von Prof. Schmidt-Hieber

- *Ziel:* Minimax-Rate unabhängig von der Input-Dimension d
- Die Regressionsfunktion f_0 lässt sich als Komposition von unterschiedlichen Funktionen schreiben

$$f_0 = g_q \circ g_{q-1} \circ \cdots \circ g_1 \circ g_0$$

mit $g_i : [a_i, b_i]^{d_i} \rightarrow [a_{i+1}, b_{i+1}]^{d_{i+1}}$.

Schreibe $g_i = (g_{ij})_{j=1,\dots,d_{i+1}}^T$ mit Komponenten g_{ij} . Es bezeichne t_i die kleinste Zahl, sodass alle g_{ij} von nicht mehr als t_i Variablen abhängen.

- **β -Hölder Funktionen** (mit Radius K)

$$\mathcal{C}_r^\beta(D, K) = \left\{ f : D \subseteq \mathbb{R}^r \rightarrow \mathbb{R} : \sum_{\alpha: |\alpha| < \beta} \|\partial^\alpha f\|_\infty + \sum_{\alpha: |\alpha| = \lfloor \beta \rfloor} \sup_{\substack{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in D \\ x \neq y}} \frac{|\partial^\alpha f(\mathbf{x}) - \partial^\alpha f(\mathbf{y})|}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_\infty^{\beta - \lfloor \beta \rfloor}} \leq K \right\}$$

- Definiere

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(q, \mathbf{d}, \mathbf{t}, \boldsymbol{\beta}, K) := & \left\{ f = g_q \circ \cdots \circ g_0 : g_i = (g_{ij})_j : [a_i, b_i]^{d_i} \rightarrow [a_{i+1}, b_{i+1}]^{d_{i+1}} \right. \\ & \left. \text{mit } g_{ij} \in \mathcal{C}_{t_i}^{\beta_i}([a_i, b_i]^{t_i}, K), \text{ für } |a_i|, |b_i| \leq K \right\} \end{aligned}$$

mit $\mathbf{d} := (d_0, \dots, d_{q+1}), \mathbf{t} := (t_0, \dots, t_q), \boldsymbol{\beta} := (\beta_0, \dots, \beta_q)$

- **Effektive Glattheits-Indizes**

$$\beta_i^* := \beta_i \prod_{\ell=i+1}^q (\beta_\ell \wedge 1)$$

- **Rate**

$$\phi_n := \max_{i=0,\dots,q} n^{-\frac{2\beta_i^*}{2\beta_i^* + t_i}}$$

5 Hauptaussagen

Theorem 1. Betrachte das d -variate Regressionsmodell (1) mit unbekannter Regressionsfunktion f_0 aus der Klasse $\mathcal{G}(q, \mathbf{d}, \mathbf{t}, \boldsymbol{\beta}, K)$. Es sei \hat{f}_n ein Schätzer mit Werten in $\mathcal{F}(L, \mathbf{p}, s, F)$ sodass

- (i) $F \geq \max(K, 1)$,
- (ii) $\sum_{i=0}^q \log_2(4t_i \vee 4\beta_i) \log_2 n \leq L \lesssim n\phi_n$,
- (iii) $n\phi_n \lesssim \min_{i=1,\dots,L} p_i$,
- (iv) $s \asymp n\phi_n \log n$

Dann existieren Konstanten C, C' , die nur von $q, \mathbf{d}, \mathbf{t}, \boldsymbol{\beta}, F$ abhängen, sodass

$$\begin{aligned} \Delta_n(\hat{f}_n, f_0) &\leq C\phi_n L \log^2 n & \Rightarrow & R(\hat{f}_n, f_0) \leq C'\phi_n L \log^2 n \\ \Delta_n(\hat{f}_n, f_0) &\geq C'\phi_n L \log^2 n & \Rightarrow & \frac{1}{C'} \Delta_n(\hat{f}_n, f_0) \leq R(\hat{f}_n, f_0) \leq C' \Delta_n(\hat{f}_n, f_0) \end{aligned}$$

Korollar 1. (Obere Schranke) Sei $f_n^{\text{ERM}} \in \arg \min f \in \mathcal{F}(L, \mathbf{p}, s, F) \sum_{i=1}^n (Y_i - f(\mathbf{X}_i))^2$ ein empirical Risk Minimizer. Dann existiert unter den Annahmen von Theorem 1 eine Konstante C' , die nur von $q, \mathbf{d}, \mathbf{t}, \boldsymbol{\beta}, F$ abhängt, sodass

$$R(\hat{f}_n^{\text{ERM}}, f_0) \leq C'\phi_n L \log^2 n$$

Theorem 3. Betrachte das d -variate Regressionsmodell (1). Weiter habe die Verteilung der \mathbf{X}_i auf $[0, 1]^d$ eine Dichte bezüglich des Lebesgue-Maßes, welche von oben und unten durch positive Konstanten beschränkt ist. Dann existiert für beliebiges nicht-negatives q , beliebigen Dimensionsvektoren \mathbf{d} und \mathbf{t} mit $t_i \leq \min(d_0, \dots, d_{i-1})$ für alle i , beliebige Regularitätsvektoren $\boldsymbol{\beta}$ und alle hinreichend große Konstanten $K > 0$, eine positive Konstante c , sodass

$$\inf_{\hat{f}_n} \sup_{f_0 \in \mathcal{G}(q, \mathbf{d}, \mathbf{t}, \boldsymbol{\beta}, K)} R(\hat{f}_n, f_0) \geq c\phi_n$$

wobei das erste Infimum über alle Schätzer \hat{f}_n gebildet wird.

Theorem 2. Betrachte das d -variate Regressionsmodell (1) mit unbekannter Regressionsfunktion f_0 mit $\|f_0\|_\infty \leq F$ für ein $F \geq 1$. Sei \hat{f}_n ein beliebiger Schätzer mit Werten in $\mathcal{F}(L, \mathbf{p}, s, F)$. Dann existiert für jedes $\varepsilon \in (0, 1]$ eine Konstante C_ε , die nur von ε abhängt, sodass mit

$$\tau_{\varepsilon,n} := C_\varepsilon F^2 \frac{(s+1) \log(n(s+1)^L p_0 p_{L+1})}{n}$$

gilt

$$(1 - \varepsilon)^2 \Delta_n(\hat{f}_n, f_0) - \tau_{\varepsilon,n} \leq R(\hat{f}_n, f_0) \leq (1 + \varepsilon^2) \left(\inf_{f \in \mathcal{F}(L, \mathbf{p}, s, F)} \|f - f_0\|_\infty^2 + \Delta_n(\hat{f}_n, f_0) \right) + \tau_{\varepsilon,n}$$