作业 2：学习理论

清华大学软件学院
机器学习，2023 年秋季学期

1 介绍

本次作业需要提交说明文档（PDF 形式）。注意事项如下：

- 本次作业总分值为 110 分，若得分超过 100 分，则按照 100 分截断。
- 作业按点给分，因此请在说明文档中按点回答，方便助教批改。
- 友情提示：即使无法完成某一小题，该题结论也可以作为后面小题的条件。
- **对于证明题而言，需要说清楚重要（不）等式或引理的名字**，例如"利用 sup 的次可加性"，"利用 2.3 题的结论"等。如果**手写作业请务必保证字迹清晰**。
- 不要使用他人的作业，也不要向他人公开自己的作业，否则处罚很严厉，会扣至-100（倒扣本次作业的全部分值）。**发现疑似抄袭将采用口试等方式进行查证**。
- 统一文件的命名：{学号}_{姓名}_hw2.pdf

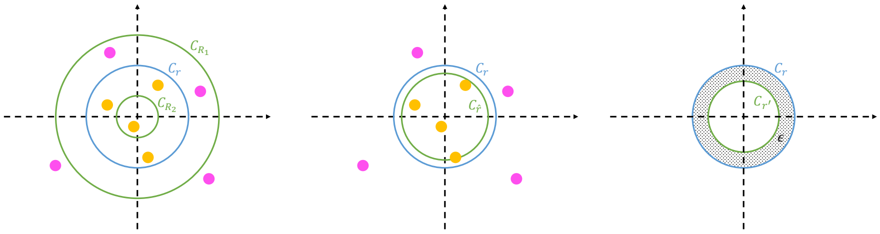
2 概率近似正确（Probably Approximately Correct）（25pt）

课件给出了 PAC 学习的一般框架，本题会介绍一个具体的实例——同心圆学习问题，来帮助你更好地理解 PAC 学习理论。

如图1(a)所示，同心圆学习问题的**输入**空间是二维平面上的所有点，即 $x \in \mathcal{X} = \mathbb{R}^2$；**标签** $y \in \mathcal{Y} = \{0, 1\}$，即平面上的点被分成正例（$y = 1$）或负例（$y = 0$）。大小为 n 的**训练样本集** $\mathcal{D}_n = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ 由分布 $D_{\mathcal{X}\times\mathcal{Y}}$ 独立同分布（i.i.d.）采样生成。具体地，x 独立同分布服从 $D_{\mathcal{X}}$，标签 y 关于输入 x 的条件分布由某个未知的、以原点为圆心的同心圆半径 r 决定：记

$$C_r = \{x \in \mathcal{X} \mid \|x\|_2 \le r\},$$

则 $\mathbb{P}[y = 1|x] = \mathbb{I}[x \in C_r]$，即所有正例点必然落在以原点为圆心，半径为 r 的圆的内部或边界上，而所有负例点必然落在该圆外部。



(a) (b) (c)

图 1: **(a)** 目标同心圆 C_r 及两种可能的同心圆样例 C_{R_1} 和 C_{R_2}。圆点表示训练样本点，黄色的圆点表示正例，粉色的圆点表示负例。**(b)** 算法返回的同心圆 $C_{\hat{r}}$ 必然在 C_r 内部。**(c)** 在 C_r 的内部取同心圆 $C_{r'}$，使得样本落在圆环区域的概率为 ϵ。

该学习问题定义为：给定训练集 $\mathcal{D}_n \sim D^n_{\mathcal{X}\times\mathcal{Y}}$，找到一个**期望误差**

$$\mathcal{E}(\hat{r}) = \mathbb{E}_{x\sim D_{\mathcal{X}}}\left[\mathbb{I}[\|x\|_2 \le r] \neq \mathbb{I}[\|x\|_2 \le \hat{r}]\right]$$

足够小的半径 $\hat{r}$。从图1(a)中可以看出，$\hat{r}$ 的误差 $\mathcal{E}(\hat{r})$ 对应的区域为 C_r 与 $C_{\hat{r}}$ 之间的圆环部分。接下来我们会逐步证明同心圆学习问题是 PAC-可学习的。

基于对数据生成分布 $D_{\mathcal{X}\times\mathcal{Y}}$ 的先验知识，我们令**假设空间** $\mathcal{H}$ 是 $\mathbb{R}^2$ 中以原点为圆心的同心圆的集合：$\mathcal{H} = \{h_\xi \mid \xi \ge 0\}, h_\xi(x) = \mathbb{I}[x \in C_\xi]$。我们给出以下**学习算法** $\mathcal{A}$：给定大小为 n 的训练集 $\mathcal{D}_n$，返回包含 $\mathcal{D}_n$ 中所有正例点的半径最小的假设，即相应的半径为

$$\hat{r} = \max_{(x,y)\in\mathcal{D}_n, y=1} \|x\|_2$$

（见图1(b)）。显然，该算法必然满足 $\hat{r} \le r$，误差 $\mathcal{E}(\hat{r})$ 对应的区域必定在圆 r 内。

固定 $\epsilon > 0$，不妨假设 $\mathbb{P}[C_r] > \epsilon$（当 $\mathbb{P}[r] \le \epsilon$ 时，很容易证明 PAC-可学习的条件）。在 C_r 的内部，构造一个新的同心圆 $C_{r'}$，使得 $\mathbb{P}[C_r \backslash C_{r'}] = \epsilon$，即 C_r 与 $C_{r'}$ 所夹的区域的概率为 ϵ 。

1. 证明误差 $\mathcal{E}(\hat{r})$ 大于 ϵ 当且仅当 $\hat{r} < r'$。（5pt）

2. 证明：

$$\mathbb{P}_{\mathcal{D}_n}\left[\mathcal{E}(\hat{r}_{\mathcal{D}_n}) > \epsilon\right] \le \exp(-n\epsilon)$$

<u>提示</u>：对于任意 $x \in \mathbb{R}, 1 - x \le e^{-x}$ 成立。（5pt）

3. 证明：该问题是 PAC-可学习的。<u>提示</u>：用 PAC-可学习的定义。（5pt）

实际当中的数据集都是存在噪音的。考虑以下情况：平面上的所有的负例点（$y=0$）的标签都保持不变 $y'=0$，所有的正例点（$y=1$）的标签以概率 $\eta \in (0, \frac{1}{2})$ 变成 $y'=0$，以 $1-\eta$ 的概率仍然为 $y'=1$。对于学习算法而言，η 是未知的。假设其上界 η' 是已知的，即 $\eta \le \eta' \le 1/2$。学习算法依然返回包含 $\mathcal{D}_n$ 中所有正例点（$y'=1$）的最小的同心圆。

4. 当存在噪音时，求 $\mathcal{E}(r)$ 和 $\mathcal{E}(r')$。（5pt）

5. 给出当存在噪音时，$\mathbb{P}_{\mathcal{D}_n \sim D^n}[\mathcal{E}(\hat{r}) > \epsilon]$ 的上界，并证明此时该问题依然是 PAC-可学习的。（5pt）

3 没有免费午餐定理（No-Free-Lunch Theorem）（20pts）

在第一堂课中，我们直观地介绍了 No-Free-Lunch Theorem，本题将从**泛化理论**的角度证明此定理。定理内容为：考虑输入域 $\mathcal{X}$ 上基于 01-loss 的二分类问题。对任意的 $n < |\mathcal{X}|/2$ 及任意的学习算法 $A : \mathcal{D}_n \mapsto h_{\mathcal{D}_n}$，总存在一个 $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ 上的分布 D，使得：

- 存在一个标签函数 $f : \mathcal{X} \to \{0, 1\}$，满足 $L_D(f) = 0$；
- 对 $\mathcal{D}_n$ 的选择，有至少 1/7 的概率，使得 $L(A(\mathcal{D}_n)) = L(h_{\mathcal{D}_n}) \ge 1/8$。

也即，无论学习算法如何，总存在一个**"棘手"的分布**，使得该学习算法总有较大（至少 1/7）的概率学到较差（$L \ge 1/8$）的假设函数。出于简化，我们首先固定下来一个大小为 $2n$ 的 $\mathcal{X}$ 的子集 C，并将输入限制在 C 上进行研究。直观上我们可以感受到，由于学习算法只能观察到 C 中一半的样本，因此学到的假设 $A(\mathcal{D}_n)$ 可能会与标签函数 f 在**未采样到**的样本上发生矛盾。回答以下问题：

1. 记所有可能的标签函数 $f : C \to \{0, 1\}$ 为 $f_1, f_2, ..., f_T$，并定义分布 $D^{(i)}$ 满足样本 $(x, y) \in C \times \{0, 1\}$ 的概率为：

$$\mathbb{P}_{D^{(i)}}[(x, y)] = \begin{cases} \frac{1}{2n}, & \text{if } y = f_i(x) \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

试求 $L_{D^{(i)}}(f_i)$。（1pt）

2. 考虑从 $D^{(i)}$ 中采样训练集的过程，容易发现这一过程只和输入的采样有关。设从 C 有放回地依次中采样 n 个元素组成的所有可能序列为 $S_1, S_2, ..., S_k$，并在标签函数 f_i 下得到数据

集 $S_1^{(i)}, S_2^{(i)}, ..., S_k^{(i)}$。

$$S_j^{(i)} = \left(\left(S_j^{(1)}, f_i(S_j^{(1)}) \right), \left(S_j^{(2)}, f_i(S_j^{(2)}) \right), ..., \left(S_j^{(n)}, f_i(S_j^{(n)}) \right) \right)。$$

令 $\mathcal{D}_n^{(i)} \sim \left(D^{(i)}\right)^n$，试理解 $\mathcal{D}_n^{(i)}$ 和 $S_1^{(i)}, S_2^{(i)}, ..., S_k^{(i)}$ 的关系，并证明：

$$\max_{1 \leq i \leq T} \mathbb{E}_{\mathcal{D}_n^{(i)}}[L_{D^{(i)}}(A(\mathcal{D}_n^{(i)}))] \geq \min_{1 \leq j \leq k} \frac{1}{T} \sum_{i=1}^{T} L_{D^{(i)}}(A(S_j^{(i)}))。$$

提示：注意到最大值 $\geq$ 平均值 $\geq$ 最小值。(5pt)

3. 对于某个固定的 j，记 $v_1, v_2, ..., v_p$ 为 C 中未在 S_j 中出现的输入元素，则显然有 $p \geq 2n - n = n$。试证明：

$$\frac{1}{T} \sum_{i=1}^{T} L_{D^{(i)}}(A(S_j^{(i)})) \geq \frac{1}{2pT} \sum_{r=1}^{p} \sum_{i=1}^{T} \mathbb{I}[A(S_j^{(i)})(v_r) \neq f_i(v_r)]。$$

提示：先证明 $L_{\mathcal{D}^i}(h) \geq \frac{1}{2p} \sum_{r=1}^{p} \mathbb{I}[h(v_r) \neq f_i(v_r)]$。(5pt)

4. 考虑到算法 A 只能观察到 S_j^i，因此无论 $v_1, v_2, ..., v_r$ 的标签如何，算法 A 找到的假设函数 $A(S_j^i)$ 总是固定的。因此在固定的输入样本 S_j 之下，我们总能将所有可能的标签函数两两配对，使得每对函数 f_i 和 $f_{i'}$ 在 S_j 上的标签完全相同，但是在 $v_1, v_2, ..., v_r$ 上的标签完全相反。借此证明：

$$\max_{1 \leq i \leq T} \mathbb{E}_{\mathcal{D}_n^i}[L_{D^{(i)}}(A(\mathcal{D}_n^{(i)}))] \geq \frac{1}{4}。$$

提示：借助第 2, 3 题的结论。(5pt)

5. 试证明 No-Free-Lunch Theorem。

提示：对 $[0,1]$ 中的随机变量 Z，有 $\mathbb{P}[Z > a] = \frac{\mathbb{E}[Z]-a}{1-a}$。无需证明此引理。(2pt)

6. 试说明：若 $\mathcal{X}$ 为无限集，假设空间 $\mathcal{H}$ 为 $\mathcal{X} \to \{0,1\}$ 的所有函数，则该分类问题不总是 PAC-可学习的。(2pt)

4 类别分布的学习（15pt）

往年考试题。现有 m 个类别，在这些类别上共有 k 种**类别分布**，第 i 种分布服从

$$\mathbb{P}_i[X = j] = p_{i,j}\,,$$

其中 $\sum_{j=1}^m p_{i,j} = 1$，$\forall 1 \le i \le m$。现在对每种分布，我们都独立同分布（$i.i.d.$）地采样了 n 条样本，并基于这些样本作出每种分布的估计

$$\hat{p}_{i,j} = \frac{1}{n}\sum_{s=1}^{n} \mathbb{I}[X_i^{(s)} = j],$$

其中 $X_i^{(s)}$ 是从第 i 个分布中采样的第 s 条样本。令

$$\mathbf{p}_i = (p_{i,1}, p_{i,2}, ..., p_{i,m}), \quad \hat{\mathbf{p}}_i = (\hat{p}_{i,1}, \hat{p}_{i,2}, ..., \hat{p}_{i,m})$$

试证明：

1. $\forall \delta > 0$，以至少 $1-\delta$ 的概率，

   $$\forall 1 \le i \le k, \quad \|\hat{\mathbf{p}}_i - \mathbf{p}_i\|_1 \le m\sqrt{\frac{1}{2n}\log\frac{2mk}{\delta}}。$$

   提示：使用集中不等式。（7pt）

2. $\forall \delta > 0$，以至少 $1-\delta$ 的概率，

   $$\forall 1 \le i \le k, \quad \|\hat{\mathbf{p}}_i - \mathbf{p}_i\|_1 \le \sqrt{\frac{2}{n}\log\frac{k\cdot 2^m}{\delta}}。$$

   提示：先注意到

   $$\forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^m, \|\mathbf{v}\|_1 = \sup_{\mathbf{u}\in\{-1,+1\}^m} \mathbf{u}^\top \mathbf{v},$$

   再使用集中不等式。（8pt）

5　有限假设空间的泛化界（15pt）

令 $\mathcal{H}$ 为一有限（或可数）假设空间：$h:\mathcal{X}\mapsto\{0,1\}$，且 p 是 $\mathcal{H}$ 上的概率测度，即

$$\sum_{h\in\mathcal{H}} p(h)=1,\quad p(h)\geq 0,\ \forall h\in\mathcal{H}$$

p 可以表示假设空间上的**先验概率**，即学习算法选择某一特定假设 h 的概率。

证明：对任意 $\delta>0$，以至少 $1-\delta$ 的概率，以下不等式成立：

$$\forall h\in\mathcal{H},\quad \mathcal{E}(h)\leq\hat{\mathcal{E}}_{\mathcal{D}_n}(h)+\sqrt{\frac{\log\frac{1}{p(h)}+\log\frac{2}{\delta}}{2n}}$$

并将以上误差界与课件上给出的误差界：

$$\forall h\in\mathcal{H},\quad \mathcal{E}(h)\leq\hat{\mathcal{E}}_{\mathcal{D}_n}(h)+\sqrt{\frac{\log|\mathcal{H}|+\log\frac{2}{\delta}}{2n}}$$

进行比较，谈谈自己的理解。提示：对 Hoeffding 不等式得到的结果进行换元 $\delta'=p(h)\delta$。（15pt）

6　无限假设空间的泛化界（35pt）

6.1　Rademacher 复杂度

固定 $n\geq 1$，对于从输入集 $\mathcal{X}$ 映射到 $\mathbb{R}$ 的假设函数集 $\mathcal{H}$ 和 $\mathcal{H}'$，证明 Rademacher 复杂度的以下性质：

1. 对假设空间的单调性：若 $\mathcal{H}\subseteq\mathcal{H}'$，则 $\mathcal{R}_n(\mathcal{H})\leq\mathcal{R}_n(\mathcal{H}')$。（3pt）

2. 缩放：$\forall\alpha\in\mathbb{R}$，$\mathcal{R}_n(\alpha\mathcal{H})=|\alpha|\mathcal{R}_n(\mathcal{H})$，其中 $\alpha\mathcal{H}=\{\alpha h\mid\forall h\in\mathcal{H}\}$。（4pt）

3. 线性组合：$\mathcal{R}_n(\mathcal{H}+\mathcal{H}')\leq\mathcal{R}_n(\mathcal{H})+\mathcal{R}_n(\mathcal{H}')$，其中 $\mathcal{H}+\mathcal{H}'=\{h+h'\mid\forall h\in\mathcal{H},\forall h'\in\mathcal{H}'\}$。（4pt）

4. 凸包：$\mathcal{R}_n(\text{convex-hull}(\mathcal{H}))=\mathcal{R}_n(\mathcal{H})$，其中

$$\text{convex-hull}(\mathcal{H})=\left\{\sum_{j=1}^{k}\lambda_j h_j\mid\forall k\in\mathbb{N}_+,\sum_{j=1}^{k}\lambda_j=1,h_1,h_2,...,h_k\in\mathcal{H}\right\}。\qquad(4\text{pt})$$

提示：只需借助定义证明经验 Rademacher 复杂度的上述性质。

6.2 增长函数

定义从 $\mathbb{R}$ 映射到 $\{+1,-1\}$ 函数族 $\mathcal{H}=\left\{h_{[a,b]} \mid a,b\in\mathbb{R}\right\}$，其中

$$h_{[a,b]}(x)=\begin{cases}+1 \text{ for } x\in[a,b],\\ -1 \text{ otherwise}\end{cases} \tag{1}$$

试给出函数族 $\mathcal{H}$ 的增长函数 $\Pi_{\mathcal{H}}(n)$，并用其导出 $\mathcal{R}_n(\mathcal{H})$ 的上界。

提示 1：使用组合数。

提示 2：后一问可直接使用课件上结果。（10pt）

6.3 VC 维

1. 平面上所有轴对齐矩形[1]构成的假设空间 $\mathcal{H}=\{\mathbb{I}\left[a\le x_1\le b, c\le x_2\le d\right] \mid \forall a\le b, \forall c\le d\}$ 的 VC 维是多少?

   提示：通过举例的方式给出下界，通过证明的方式给出上界，证明用文字和图形表述即可。不考虑点共线的情况。（5pt）

2. $\mathcal{H}=\{\mathbb{I}\left[\sin(x+a)>0\right] \mid \forall a\in\mathbb{R}\}$ 的 VC 维是多少?

   提示：$\mathbb{I}[\sin(x+a)>0]$ 是周期函数。（5pt）

[1]边和坐标轴平行的矩形，当样本在矩形内部时为标签 1，否则为标签 0