

Contents

| | |
|---|----------|
| 1 概述 | 2 |
| 1.1 统计学习三要素 | 2 |
| 1.1.1 模型 | 2 |
| 1.1.2 策略 | 2 |
| 1.1.3 算法 | 4 |
| 1.2 模型评估与模型选择 | 4 |
| 1.2.1 训练误差与测试误差 | 4 |
| 1.2.2 过拟合与模型选择 | 4 |
| 1.3 正则化与交叉验证 | 4 |
| 1.3.1 正则化 | 4 |
| 1.3.2 交叉验证 | 4 |
| 1.4 泛化能力 | 4 |
| 1.4.1 泛化误差 | 4 |
| 1.4.2 泛化误差上界 | 5 |
| 1.5 生成模型与判别模型 | 5 |
| 1.6 分类问题 | 5 |
| 1.7 标注问题 | 5 |
| 1.8 回归问题 | 5 |
| 2 感知机 | 5 |
| 3 k 近邻法 | 5 |
| 4 朴素贝叶斯法 | 5 |
| 5 决策树 | 5 |
| 6 logistic 回归与最大熵模型 | 5 |
| 7 支持向量机 | 6 |
| 8 提升方法 | 6 |
| 9 EM 算法及其推广 | 6 |
| 10 隐马尔可夫模型 | 6 |
| 11 条件随机场 | 6 |
| 12 附录 | 6 |
| 12.1 矩阵 | 6 |
| 12.2 优化 | 6 |
| 12.2.1 拉格朗日乘子法 | 6 |
| 12.2.2 梯度下降 | 7 |
| 12.2.3 牛顿法 | 8 |
| 12.2.4 拟牛顿法的思路 | 9 |
| 12.2.5 DFP(Davidon-Fletcher-Powell) | 9 |
| 12.2.6 BFGS(Broydon-Fletcher-Goldfarb-Shanno) | 10 |
| 12.3 拉格朗日对偶性 | 10 |

本文参考自李航的《统计学习方法》、周志华的《机器学习》等。

1 概述

1.1 统计学习三要素

1.1.1 模型

监督学习中，模型是要学习的条件概率分布或决策函数。

1.1.1.1 模型的假设空间

假设空间是所有可能的条件概率分布或决策函数

1.1.1.1.1 定义 1

可以定义为决策函数的集合：

$$\mathcal{F} = \{f|Y = f(X)\}$$

- X 和 Y 是定义在 \mathcal{X} 和 \mathcal{Y} 上的变量
- \mathcal{F} 是一个参数向量决定的函数族：

$$\mathcal{F} = \{f|Y = f_{\theta}(X), \theta \in R^n\}$$

参数向量 θ 取值于 n 维欧式空间 R^n ，称为参数空间

1.1.1.1.2 定义 2

也可以定义为条件概率的集合：

$$\mathcal{F} = \{P|P(Y|X)\}$$

- X 和 Y 是定义在 \mathcal{X} 和 \mathcal{Y} 上的随机变量
- \mathcal{F} 是一个参数向量决定的条件概率分布族：

$$\mathcal{F} = \{P|P_{\theta}(Y|X), \theta \in R^n\}$$

1.1.2 策略

1.1.2.1 损失函数与风险函数

损失函数（loss function）或代价函数（cost function）：度量预测值 $f(X)$ 与真实值 Y 的误差程度，记为 $L(Y, f(X))$ ，是个非负实值函数。损失函数越小，模型越好。

- 0-1 损失函数：

$$L(Y, f(X)) = \begin{cases} 0 & Y \neq f(X) \\ 1 & Y = f(X) \end{cases}$$

- 平方损失函数：

$$L(Y, f(X)) = (Y - f(X))^2$$

- 绝对损失函数：

$$L(Y, f(x)) = |Y - f(X)|$$

- 对数损失函数 (logarithmic loss function)/对数似然损失函数 (log-likelihood loss function):

$$L(Y, P(Y|X)) = -\log P(Y|X)$$

风险函数 (**risk function**) 或期望损失 (**expected loss**): X 和 Y 服从联合分布 $P(X, Y)$, 理论上模型 $f(X)$ 关于联合分布 $P(X, Y)$ 的平均意义下的损失:

$$R_{exp}(f) = E_P[L(Y, f(X))] = \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} L(y, f(x)) P(x, y) dx dy$$

学习的目标: 选择期望风险最小的模型。但联合分布 $P(X, Y)$ 是未知的, 所以无法直接计算 $R_{exp}(f)$ 。所以监督学习是病态问题 (ill-formed problem): 一方面需要联合分布, 另一方面联合分布是未知的。

给定训练集:

$$T = \{(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)\}$$

经验风险 (**empirical risk**)/经验损失 (**empirical loss**): 模型 $f(X)$ 关于训练集的平均损失

$$R_{emp}(f) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(y_i, f(x_i))$$

根据大数定律, 当样本容量 N 趋向无穷时, 经验风险 R_{emp} 趋于期望风险 $R_{exp}(f)$ 。

1.1.2.2 经验风险最小化与结构风险最小化

经验风险最小化 (**empirical risk minimization, ERM**): 经验风险最小的模型就是最优模型。所以需要求解的最优化问题是:

$$\min_{f \in \mathcal{F}} R_{erm} = \min_{f \in \mathcal{F}} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(y_i, f(x_i))$$

当满足以下两个条件时, 经验风险最小化就等价于极大似然估计 (maximum likelihood estimation):

- 模型是条件概率分布
- 损失函数是对数损失函数

当样本量足够大时, ERM 能有很好的效果, 但样本量不够多时, 为了防止过拟合, 需要用下面的方法。

结构风险最小化 (**structural risk minimization, SRM**): 结构风险 = 经验风险 + 表示模型复杂度的正则化项 (regularizer) 或罚项 (penalty term)。结构风险定义如下:

$$R_{srn}(f) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(y_i, f(x_i)) + \lambda J(f)$$

$J(f)$ 是模型的复杂度, 模型越复杂, $J(f)$ 越大。 $\lambda \geq 0$ 是用于权衡经验风险和模型复杂度的系数。

当满足以下 3 个条件时, 结构化风险最小化等价于贝叶斯估计中的最大后验概率估计 (maximum posterior probability estimation, MAP):

- 模型是条件概率分布
- 损失函数是对数损失函数
- 模型复杂度由模型的先验概率表示

所以结构风险最小化就是求解优化问题：

$$\min_{f \in \mathcal{F}} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(y_i, f(x_i)) + \lambda J(f)$$

1.1.3 算法

算法指的是学习模型的具体方法，即使用什么计算方法求解最优模型。

因为统计学习问题归结为最优化问题，所以统计学习的算法就是求解最优化问题的算法。

- 如果有显式的解析解，此最优化问题就比较简单
- 如果没有，需要用数值计算方法求解，需要考虑如何保证找到全局最优解，并使求解过程高效

1.2 模型评估与模型选择

a

1.2.1 训练误差与测试误差

a

1.2.2 过拟合与模型选择

b

1.3 正则化与交叉验证

c

1.3.1 正则化

d

1.3.2 交叉验证

e

1.4 泛化能力

f

1.4.1 泛化误差

g

1.4.2 泛化误差上界

a

1.5 生成模型与判别模型

a

1.6 分类问题

a

1.7 标注问题

c

1.8 回归问题

b

2 感知机

d

3 k 近邻法

e

4 朴素贝叶斯法

x

5 决策树

w

6 logistic 回归与最大熵模型

o

7 支持向量机

u

8 提升方法

q

9 EM 算法及其推广

e

10 隐马尔可夫模型

c

11 条件随机场

b

12 附录

e

12.1 矩阵

e

12.2 优化

c

12.2.1 拉格朗日乘子法

拉格朗日乘子法 (Lagrange multipliers) 是一种寻找多元函数在一组约束下的极值的方法。通过引入拉格朗日乘子, 将 d 个变量和 k 个约束条件的最优化问题转化为具有 $d + k$ 个变量的无约束优化问题求解。

先考虑

12.2.2 梯度下降

12.2.2.1 《统计学习方法》的视角

假设 $f(x)$ 有一阶连续偏导，对于无约束的最优化问题而言：

$$\min_{x \in R^n} f(x)$$

$f(x)$ 在 $x^{(k)}$ 附近的一阶泰勒展开如下，其中 $g_k = g(x^{(k)}) = \nabla f(x^{(k)})$ 是 $f(x)$ 在 $x^{(k)}$ 的梯度：

$$f(x) = f(x^{(k)}) + g_k^T (x - x^{(k)})$$

所以对于 $x = x^{(k+1)}$ ：

$$f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)}) + g_k^T (x^{(k+1)} - x^{(k)})$$

令 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k p_k$ ， p_k 是搜索方向， λ_k 是步长，代入上式，有

$$\begin{aligned} f(x^{(k+1)}) &= f(x^{(k)}) + g_k^T (x^{(k)} + \lambda_k p_k - x^{(k)}) \\ &= f(x^{(k)}) + g_k^T \lambda_k p_k \end{aligned}$$

为了让每次迭代的函数值变小，可以取 $p_k = -\nabla f(x^{(k)})$

把 λ_k 看成是可变化的，所以需要搜索 λ_k 使得

$$f(x^{(k)} + \lambda_k p_k) = \min_{\lambda \geq 0} f(x^{(k)} + \lambda p_k)$$

梯度下降法：

输入：目标函数 $f(x)$ ，梯度 $g(x) = \nabla f(x)$ ，精度要求 ε 。

输出： $f(x)$ 的极小点 x^* 。

1. 取初始值 $x^{(0)} \in R^n$ ，置 $k = 0$
2. 计算 $f(x^{(k)})$
3. 计算梯度 $g_k = g(x^{(k)})$ ，当 $\|g_k\| < \varepsilon$ ，则停止计算，得到近似解 $x^* = x^{(k)}$ ；否则，令 $p_k = -g(x^{(k)})$ ，求 λ_k 使得

$$f(x^{(k)} + \lambda_k p_k) = \min_{\lambda \geq 0} f(x^{(k)} + \lambda p_k)$$

4. 置 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k p_k$ ，计算 $f(x^{(k+1)})$ 当 $\|f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)})\| < \varepsilon$ 或 $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| < \varepsilon$ 时，停止迭代，令 $x^* = x^{(k+1)}$
5. 否则，置 $k = k + 1$ ，转第 3 步

只有当目标函数是凸函数时，梯度下降得到的才是全局最优解。

12.2.2.2 《机器学习》的视角

梯度下降是一阶 (first order) (只用一阶导，不用高阶导数) 优化方法，是求解无约束优化问题最简单、最经典的方法之一。

考虑无约束优化问题 $\min_x f(x)$ ， $f(x)$ 是连续可微函数，如果能构造一个序列 x^0, x^1, x^2, \dots 满足

$$f(x^{t+1}) < f(x^t), t = 0, 1, 2, \dots$$

那么不断执行这个过程，就可以收敛到局部极小点，根据泰勒展开有：

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T (x - x^{(k)}) \\ f(x + \Delta x) &= f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T (x + \Delta x - x^{(k)}) \\ &= f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T (x - x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T \Delta x \\ &= f(x) + \nabla f(x^{(k)})^T \Delta x \end{aligned}$$

而 $\nabla f(x^{(k)})^T \Delta x$ 是一个标量，其转置等于自己，所以

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \Delta x^T \nabla f(x^{(k)})$$

想要让 $f(x + \Delta x) < f(x)$ ，只需要令：

$$\Delta x = -\gamma \nabla f(x)$$

其中的步长 γ 是一个小常数

如果 $f(x)$ 满足 L -Lipschitz 条件，也就是说对于任意的 x ，存在常数 L ，使得 $\|\nabla f(x)\| \leq L$ 成立，那么设置步长为 $\frac{1}{2L}$ 就可以确保收敛到局部极小点。

同样地，当目标函数是凸函数时，局部极小点就对应全局最小点，此时梯度下降可以确保收敛到全局最优解。

12.2.3 牛顿法

12.2.3.1 二阶导基本性质

对于点 $x = x_0$ ，

- 一阶导 $f'(x_0) = 0$ 时，如果二阶导 $f''(x_0) > 0$ ，那么 $f(x_0)$ 是极小值， x_0 是极小点
- 一阶导 $f'(x_0) = 0$ ，如果二阶导 $f''(x_0) < 0$ ，那么 $f(x_0)$ 是极大值， x_0 是极大点
- 一阶导 $f'(x_0) = 0$ ，如果二阶导 $f''(x_0) = 0$ ，那么 x_0 是鞍点

证明：

对于任意 x_1 ，根据二阶泰勒展开，有

$$f(x_1) = f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x_1 - x_0)^2 + \dots + R_n(x_1)$$

因为 $f''(x_0) > 0$ 且 $f'(x_0) = 0$ ，所以，不论 $x_1 > x_0$ 还是 $x_1 < x_0$ ，总有 $f(x_1) > f(x_0)$ ，也就是周围的函数值都比 $f(x_0)$ 大，而 x_0 又是极值点，所以是极小点。

12.2.3.2 牛顿法

对于矩阵形式， x 是一个 $n \times 1$ 的列向量， $H(x)$ 是 $f(x)$ 的海赛矩阵，即二阶导，shape 是 $n \times n$ ：

$$f(x) = f(x^{(k)}) + g_k^T (x - x^{(k)}) + \frac{1}{2}(x - x^{(k)})^T H(x^{(k)})(x - x^{(k)})$$

函数 $f(x)$ 有极值的必要条件是在极值点处一阶导为 0，特别地，当 $H(x^{(k)})$ 是正定矩阵时（二阶导大于 0），是极小值。

牛顿法利用极小点的必要条件 $\nabla f(x) = 0$ ，每次迭代从点 $x^{(k)}$ 开始，求目标函数极小点，作为第 $k + 1$ 次迭代值 $x^{(k+1)}$ ，具体地，假设 $\nabla f(x^{(k+1)}) = 0$ ，有

$$\begin{aligned}
f(x) &= f(x^{(k)}) + g_k^T(x - x^{(k)}) + \frac{1}{2}(x - x^{(k)})^T H(x^{(k)})(x - x^{(k)}) \\
&= f(x^{(k)}) + [g_k^T + \frac{1}{2}(x - x^{(k)})^T H(x^{(k)})](x - x^{(k)}) \\
&= f(x^{(k)}) + [g_k + \frac{1}{2}H(x^{(k)})(x - x^{(k)})]^T(x - x^{(k)})
\end{aligned}$$

把其中的 $g_k + \frac{1}{2}H(x^{(k)})(x - x^{(k)})$ 看成一阶导，则上式就是一阶泰勒展开。记 $H^k = H(x^{(k)})$ ，令 $x = x^{(k+1)}$ ，令一阶导为 0：

$$\begin{aligned}
g_k + \frac{1}{2}H^k(x^{(k+1)} - x^{(k)}) &= 0 \\
g_k &= -\frac{1}{2}H^k(x^{(k+1)} - x^{(k)}) \\
-2H_k^{-1}g_k &= x^{(k+1)} - x^{(k)} \\
x^{(k+1)} &= -2H_k^{-1}g_k + x^{(k)}
\end{aligned}$$

可以无视这个 2，变成：

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - H_k^{-1}g_k$$

或者

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + p_k$$

其中，

$$H_k p_k = -g_k$$

牛顿法：

输入：目标函数 $f(x)$ ，梯度 $g(x) = \nabla f(x)$ ，海赛矩阵 $H(x)$ ，精度要求 ε 。

输出： $f(x)$ 的极小点 x^* 。

1. 取初始点 $x^{(0)}$ ，置 $k = 0$
2. 计算 $g_k = g(x^{(k)})$
3. 若 $\|g_k\| < \varepsilon$ ，则停止计算，得到近似解 $x^* = x^{(k)}$
4. 计算 $H_k = H(x^{(k)})$ ，并求 p_k ，满足

$$H_k p_k = -g_k$$

5. 置 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + p_k$
6. 置 $k = k + 1$ ，转到第 2 步

其中的步骤 4，求 p_k 时， $p_k = -H_k^{-1}g_k$ 需要求解 H_k^{-1} 很复杂。

12.2.4 拟牛顿法的思路

基本想法就是通过一个 n 阶矩阵 $G_k = G(x^{(k)})$ 来近似代替 $H^{-1}(x^{(k)})$ 。

12.2.5 DFP(Davidon-Fletcher-Powell)

x

12.2.6 BFGS(Broydon-Fletcher-Goldfarb-Shanno)

x

12.3 拉格朗日对偶性

x