

# Contents

<b>1 概述</b>	<b>2</b>
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
<b>2 感知机</b>	<b>5</b>
<b>3 k 近邻法</b>	<b>5</b>
<b>4 朴素贝叶斯法</b>	<b>5</b>
<b>5 决策树</b>	<b>5</b>
<b>6 logistic 回归与最大熵模型</b>	<b>5</b>
<b>7 支持向量机</b>	<b>6</b>
<b>8 提升方法</b>	<b>6</b>
<b>9 EM 算法及其推广</b>	<b>6</b>
<b>10 隐马尔可夫模型</b>	<b>6</b>
<b>11 条件随机场</b>	<b>6</b>
<b>12 附录</b>	<b>6</b>
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	9
12.2.3 牛顿法	11
12.2.4 拟牛顿法的思路	12
12.2.5 DFP(Davidon-Fletcher-Powell)	12
12.2.6 BFGS(Broydon-Fletcher-Goldfarb-Shanno)	12
12.3 拉格朗日对偶性	12

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  $\theta$  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:

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

$J(f)$  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。

### 12.2.1.1 等式约束

假设  $x$  是  $d$  维向量, 要寻找  $x$  的某个取值  $x^*$ , 使目标函数  $f(x)$  最小且同时满足  $g(x) = 0$  的约束。

从几何角度看, 目标是在由方程  $g(x) = 0$  确定的  $d - 1$  维曲面上, 寻找能使目标函数  $f(x)$  最小化的点。

1. 对于约束曲面  $g(x) = 0$  上的任意点  $x$ , 该点的梯度  $\nabla g(x)$  正交于约束曲面
2. 在最优点  $x^*$ , 目标函数  $f(x)$  在该点的梯度  $\nabla f(x^*)$  正交于约束曲面

对于第 1 条, 梯度本身就与曲面的切向量垂直, 是曲面的法向量, 并且指向数值更高的等值线。

证明:

参考<http://xuxzmail.blog.163.com/blog/static/251319162010328103227654/>

$z = f(x, y)$  的等值线:  $\Gamma: f(x, y) = c$ , 两边求微分:

$$\begin{aligned} df(x, y) &= dc \\ \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy &= 0 \end{aligned}$$

看成两个向量的内积:

$$\frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy = \left\{ \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y} \right\} \cdot \{dx, dy\} = 0$$

而内积  $a \cdot b = |a||b|\cos\theta$  为 0 说明夹角是 90 度, 而  $\left\{ \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y} \right\}$  是梯度向量,  $\{dx, dy\}$  是等值线的切向量, 所以梯度向量和切向量是垂直的。

对于第 2 条, 可以用反证法, 如下图, 蓝色是  $g(x) = 0$ , 橙色是  $f(x)$  的等值线 (图里假设  $f(x) = x^2 + y^2$ ), 交点的  $\nabla f(x^*)$  的梯度和  $g(x)$  的切面不垂直, 那么, 可以找到更小的等值线, 使夹角更接近 90 度, 也就是说, 这个点不是真正的最优点  $x^*$ 。



Figure 1: 等式约束-非相切

所以, 在最优点  $x^*$  处, 梯度  $\nabla g(x)$  和  $\nabla f(x)$  的方向必然相同或相反, 也就是存在  $\lambda \neq 0$ , 使得:

$$\nabla f(x^*) + \lambda \nabla g(x^*) = 0$$

$\lambda$  是拉格朗日乘子, 定义拉格朗日函数

$$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda g(x)$$

$L(x, \lambda)$  对  $x$  的偏导  $\nabla_x L(x, \lambda)$  置 0, 就得到:

$$\nabla f(x) + \lambda \nabla g(x) = 0$$

而  $L(x, \lambda)$  对  $\lambda$  的偏导  $\nabla_\lambda L(x, \lambda)$  置 0, 就得到

$$g(x) = 0$$

所以, 原约束问题可以转化为对  $L(x, \lambda)$  的无约束优化问题。

### 12.2.1.2 不等式约束

考虑不等式约束  $g(x) \leq 0$ , 最优值或者在边界  $g(x) = 0$  上, 或者在区域  $g(x) < 0$  中。



Figure 2: (a) 是等式约束, (b) 是不等式约束

- 对于  $g(x) < 0$

相当于使  $f(x)$  取得最小值的点落在可行域内, 所以约束条件相当于没有用, 所以, 直接对  $f(x)$  求极小值即可。因为  $L(x, \lambda) = f(x) + \lambda g(x)$ , 所以

$$\nabla_x L(x, \lambda) = \nabla f(x) + \lambda \nabla g(x)$$

因为  $g(x) < 0$ , 想要只让  $\nabla f(x) = 0$ , 那么令  $\lambda = 0$  即可。

- 对于  $g(x) = 0$

这就变成了等式约束, 且此时  $\nabla f(x^*)$  和  $\nabla g(x^*)$  反向相反。因为在  $g(x) = 0$  越往里值是越小的, 而梯度是指向等值线高的方向, 所以梯度是指向外的。而  $f(x)$  的可行域又在  $g(x)$  的里面和边界上, 我们要找的是  $f(x)$  的最小值, 所以  $f(x)$  的梯度是指向内部的。

而  $\nabla f(x) + \lambda \nabla g(x) = 0$ , 两个又是反向的, 所以  $\lambda > 0$ 。

结合  $g(x) \leq 0$  和  $g(x) = 0$  两种情况的结论, 就得到了 KKT (Karush-Kuhn-Tucker) 条件

$$\left. \begin{array}{l} g(x) = 0, \lambda > 0 \\ g(x) < 0, \lambda = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{cases} g(x) \leq 0 \\ \lambda \geq 0 \\ \lambda g(x) = 0 \end{cases}$$

其中  $\lambda g(x) = 0$  是因为  $\lambda$  和  $g(x)$  至少一个是 0, 而且不能都不是 0。

以上三个条件有各自的名字:



- Primal feasibility(原始可行性):  $g(x) \leq 0$
- Dual feasibility(对偶可行性):  $\lambda \geq 0$
- Complementary slackness:  $\lambda g(x) = 0$

### 12.2.1.3 带等式和不等式约束的拉格朗日乘子法

对于多个约束的情形,  $m$  个等式约束和  $n$  个不等式约束, 可行域  $\mathbb{D} \subset \mathbb{R}^d$  非空的优化问题:

$$\begin{aligned} \min_x & f(x) \\ \text{s.t.} & h_i(x) = 0, i = 1, \dots, m \\ & g_j(x) \leq 0, j = 1, \dots, n \end{aligned}$$

引入拉格朗日乘子  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)^T$  和  $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)^T$ , 相应的拉格朗日函数为:

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i h_i(x) + \sum_{j=1}^n \mu_j g_j(x)$$

由不等式约束引入的 KKT 条件 ( $j = 1, 2, \dots, n$ ) 为

$$\begin{cases} g_j(x) \leq 0 \\ \mu_j \geq 0 \\ \mu_j g_j(x) = 0 \end{cases}$$

## 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:

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

$f(x)$  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,  $\lambda_k$  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  $\lambda_k$  看成是可变化的, 所以需要搜索  $\lambda_k$  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  $\varepsilon$ 。

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  $\lambda_k$  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  $\gamma$  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  $n \times n$ :

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

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

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

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  $\varepsilon$ 。

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