

机器学习笔记—偏差和方差

空修菜

1 偏差和方差 (Bias And Variance)

1. 偏差和方差的均衡可以用来分析过拟合和欠拟合问题.
2. S 是 training set. $S = \{(x^{(i)}, y^{(i)}) : i = 1, 2, \dots, n\}$. 关于 S 的统计规律, 可以用函数 $f(x)$ 进行刻画, 即

$$y = f(x) + \varepsilon,$$

$f(x)$ 是 true function, 只要取 $f(x_i)$ 加上一个误差 ε_i 就可以得到准确的不存在偏差的 target value $y^{(i)}$. 但实际上不可能求得这样的函数, 只能通过 $\hat{f}(x)$ 来模拟、逼近;

3. 误差 (泛化误差) 分解. 因为, $\hat{\varepsilon} = y - \hat{f}$, 进行误差分解后, 有:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\hat{\varepsilon}^2] &= \mathbb{E}[(y - \hat{f})^2] = \mathbb{E}[(f + \varepsilon - \hat{f})^2] = \mathbb{E}[(f + \varepsilon - \hat{f} + \mathbb{E}[\hat{f}] - \mathbb{E}[\hat{f}])^2] \\ &= \mathbb{E}[((f - \mathbb{E}[\hat{f}]) + (\mathbb{E}[\hat{f}] - \hat{f}) + \varepsilon)^2] \\ &= (f - \mathbb{E}[\hat{f}])^2 + \mathbb{E}[\varepsilon^2] + \mathbb{E}[(\mathbb{E}[\hat{f}] - \hat{f})^2] \\ &= (f - \mathbb{E}[\hat{f}])^2 + \text{Var}[\varepsilon] + \text{Var}[\hat{f}] \\ &= (f - \mathbb{E}[\hat{f}])^2 + \sigma^2 + \text{Var}[\hat{f}].\end{aligned}$$

4. 在上面的误差分解中, $(f - \mathbb{E}[\hat{f}])^2$ 是偏差 (bias); $\text{Var}[\hat{f}]$ 是方差 (variance).
 - (1). *Bias*: 指的是预测函数 \hat{f} 的期望与 true function f 或者最优函数 f 的差. 它度量的是一个模型在不同训练集上的平均性能与最后函数的差异, 可用于描述拟合度.
 - (2). *Variance*: 指的是预测函数 \hat{f} 的期望与预测函数 \hat{f} 的差. 它是一个模型在不同训练集上的差异, 可用于度量是否过拟合.

5. 可以从偏差和方差的关系来分析模型的误差.
- (1). 偏差低表示同一个模型在不同训练集上的平均性能与最优模型很靠近; 方差都低表示同一个模型在不同训练集之间差异不大, 差异程度不大. 此时的模型最理想.
 - (2). 若偏差高, 方差低. 偏差高说明模型的对数据规律的刻画不够, 没有充分反映特征与目标值之间的关系, 欠拟合; 方差低说明模型对数据集的变化不敏感, 对不同的数据集变化不大, 泛化能力很好.
 - (3). 若偏差低, 方差高. 偏差低说明模型充分刻画了数据规律, 拟合的很好; 方差高说明模型对于数据的变化十分敏感, 稍稍改变数据集就能得到另一个不同的映射规律, 模型不稳定. 过拟合;
 - (4). 偏差、方差都高. 模型既没有充分刻画数据集的规律, 也没有保持较好的稳定性.