暑期讲义

作者：有80%信心的DSY

主旨：阿巴阿巴随便写点，慢慢丰富

序言：暂无

参考书籍：《机器学习》（周志华西瓜书），《统计学习方法》（李航），《deep learning book》，《Understanding Machine Learning: From Theory to Algorithms》，《High-dimensional probability : an introduction with applications in data science》，pytorch doc

私货极多欢迎批评，邮箱：madsy@mail.scut.edu.cn

想感谢的人：暂时没想好

献给XXXX

最近前面内容好像有个主旨：本讲义想从机器学习基本问题出发，讲明白对于神经网络甚至更广义的可微模型编程建模逻辑。

1.1机器学习基础概念

1.1集合与模型

1.1.1 事件集，Definition：

真实世界里我们研究对象数值建模化的集合Ω.

eg：如各种各样的图片，声音，文本，信号。

1.1.2 输入空间，Definition：

所有可能的输入元素组成的集合$\mathcal{X}$，**事件集一定是输入空间。**

1.1.3 输出空间，Definition：

所有可能的输出元素组成的集合$\mathcal{Y}$，**事件集可以是输出空间。**

1.1.4联合分布假设:x

对于定义在$\mathcal{X}$和$\mathcal{Y}$上的随机变量X, Y，我们假设在$\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$上其存在联合分布。

1.1.5真实映射假设:

对于定义在$\mathcal{X}$和$\mathcal{Y}$，我们假设存在最优的映射$y = F(x)$,$P(x, y)$可以转换为$P'(x)$.（$P(x, y) = P(x, F(x))$）)

1.1.6数据集（样本点观测集），Definition：

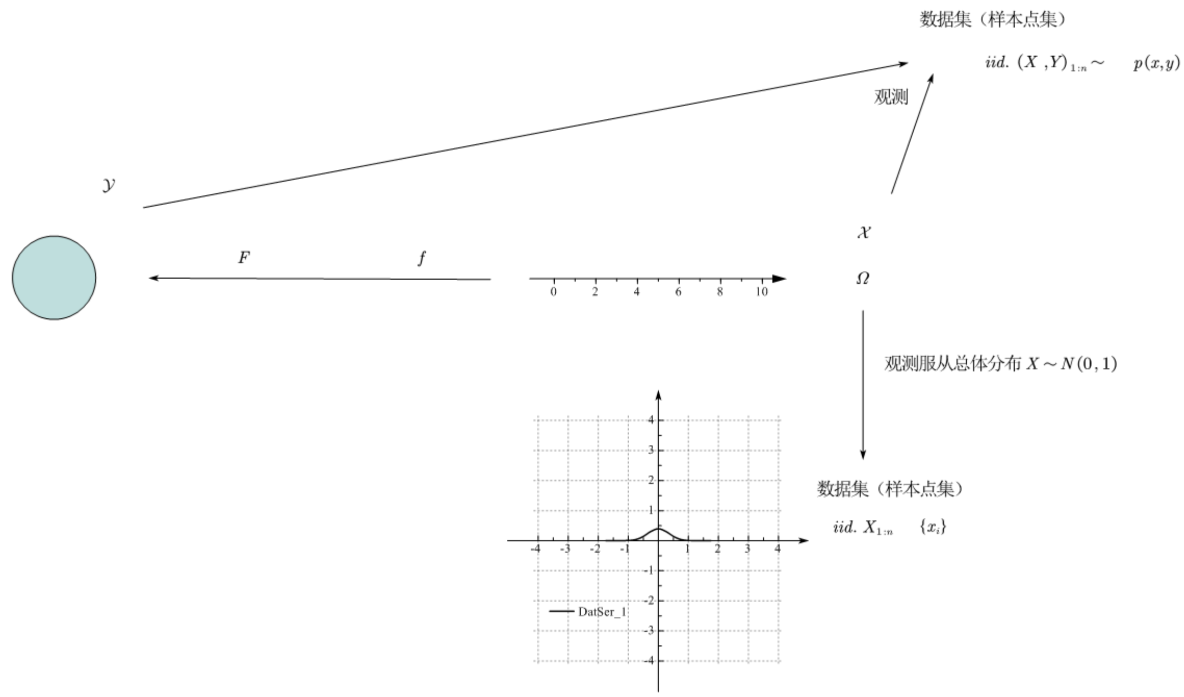
对应集合上定义的随机变量，观察/采样到的独立同分布的样本点集。

eg:比如对于$\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$上的数据集$\{(x_i, y_i)\} \sim P(x, y)$

1.1.7模型，Definition：

定义在由$\mathcal{X}$到$\mathcal{Y}$的一个映射f，该模型既可以是概率模型$P(x)$，也可以是非概率模型$f(x)$

观测过程eg:



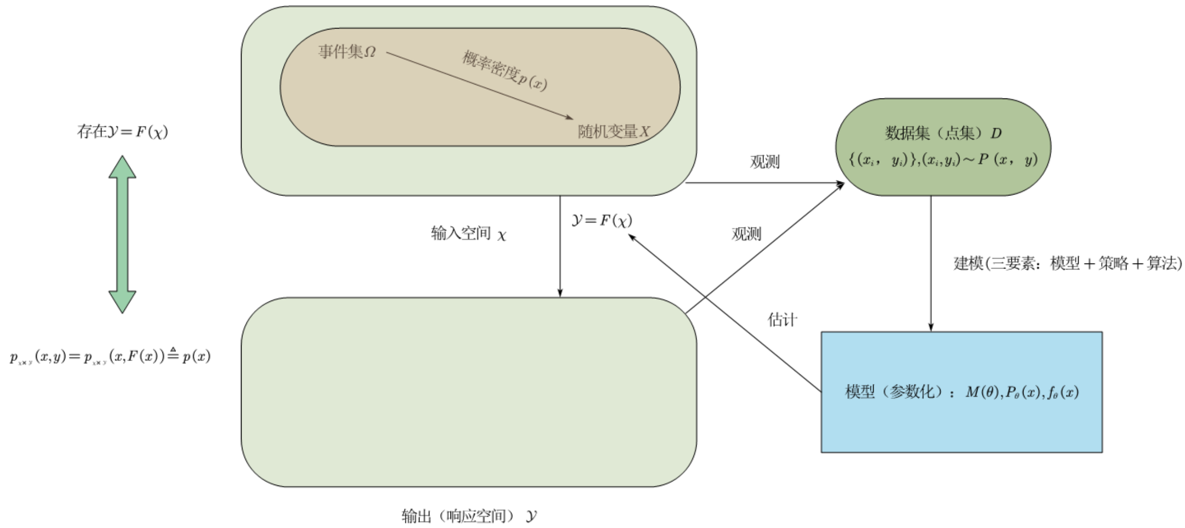
1.1.8假设空间，Definition：

对于我们假设所有可能模型f的集合$\mathcal{H}$.

1.1.9参数化模型及其假设空间，Definition：

定义在由$\mathcal{X}$到$\mathcal{Y}$的映射f由参数θ参数化，$\theta \in \Theta$,我们可以由Θ定义我们的假设空间$\mathcal{H}_\Theta$

eg:$\{f|f(x)=ax+b, a \in R, b \in R\}$定义了所有直线构成的假设空间。



1.2泛化误差及变分问题

1.2.1损失函数，Definition：

对于输出空间$\mathcal{Y}$,$\forall a,b\in\mathcal{Y}$对于二元函数$L(a,b)$,$L$满足：

$$\begin{aligned}&L(a,b)\geqslant 0\\&L(a,b)=0,\text{if and only if }a=b\end{aligned}$$

eg:

如果$\mathcal{Y}$是一个度量空间，则其上任意一个距离d都是损失函数。

1.2.3泛化误差，Definition：

对于一对输入输出空间$\mathcal{X}$和$\mathcal{Y}$上的随机变量X,Y，对任意模型f,我们称：

$$\begin{aligned}&R_{\exp}(f)\triangleq E_{P,\mathcal{X}\times\mathcal{Y}}[L(\mathcal{Y},f(X))]=\int_{\mathcal{X}\times\mathcal{Y}}L(y,f(x))p(x,y)dxdy\\&or\ R_{\exp}(f)\triangleq E_{P,\mathcal{X}}[L(F(X),f(X))]=\int_{\mathcal{X}}L(F(x),f(x))p'(x)dx\end{aligned}$$

What does Machine Learning do?

$$\min_{f\in\mathcal{H}}R_{exp}(f)=R(f)$$

1.2expand:泛函

1.2.3泛函，Definition：

集合$\mathcal{H}$是一个函数集合，R是实数域，我们定义$\mathcal{H}$到R的一个映射$y=J(f)$为泛函。（本质是向量空间到标量的映射）。泛函一般由积分定义，实际上我们已经接触过很多可以定义泛函的东西。

eg:

$$J(y)=\int_{x0}^{x1}\sqrt{1+y'^2}dx$$

为二维平面上，过点$x0,x1$的所有可微曲线的泛函，该泛函的意义是这些曲线的长度。

$$J(p)=-\int p(x)log\,p(x)dx$$

这是信息熵，衡量随机变量不确定性的泛函。

$$J(p)=KL(p||q)=\int p(x)log\frac{p(x)}{q(x)}$$

这是关于p和q的一个损失。

当然泛化误差也可以定义一种泛函：

$$J(f)=R_{\exp}(f)\triangleq E_{P,\mathcal{X}\times\mathcal{Y}}[L(\mathcal{Y},f(X))]=\int_{\mathcal{X}\times\mathcal{Y}}L(\mathcal{Y},f(x))p(x,y)dxdy$$

那么机器学习和泛函有什么关系?

1.2.4泛函极值（变分问题）Definition：

我们称对于一个定义在$\mathcal{H}$上的泛函$J(f)$，问题

$$\min_{f\in\mathcal{H}}J(f)$$

称之为泛函极值问题，也可以叫做变分问题。

机器学习的数学抽象本质是变分问题，我们试图要最小化泛化误差这个泛函：

$$\min_{f\in\mathcal{H}}R_{exp}(f)=R(f)$$

对于由损失函数定义的变分问题，最优解是显然的，若真实映射$F\in\mathcal{H}$,F是最优解，不过很可惜，和传统的泛函分析面对的变分问题不同，我们无法解析的求解该变分问题。

原因有一下这么几个：

1.最重要的原因：我们无法解析知道输入空间输出空间确切的分布，和整个集合。我们所能拿到的只有数据集（样本点观测集）。

2.真实映射F是不可知的，我们的假设空间很难包含F

...

那么如何去求解该变分问题?

答案：借助概率论，实分析，测度论的工具进行估计，用统计量建立的学习策略，统计量是可以计算的，再通过参数化模型把变分问题转换成数值优化问题。

转化成

$$\min_{f\in\mathcal{H}}\hat{R}(f)$$

1.3PAC Theory

1.3.1经验损失，Definition：

对于可观测到的N个点集——数据集$\{(x_i, y_i)\} \sim P(x, y)$

我们定义一种常见的学习策略$\hat{R}(f)$：

$$\hat{R}(f) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} L\left(F(x_i), f\left(x_i\right)\right)$$

为经验损失。

变分问题裂解

考虑：

$$R(f) = [R(f) - \hat{R}(f)] + \hat{R}(f)$$

1.3.2Generalization Gap，Definition：

我们定义如上裂解中方括号中的内容$[R(f) - \hat{R}(f)]$叫做**Generalization Gap**，此后记为**GP**。

这是个很重要的分解，可以这么说，这个看起来平常的式子，把一个变分问题拆成两部分，前面交给统计学家，后面交给优化学家。

抽象理解：

对于**GP**问题，统计学家要干的事情就是通过概率论，实分析，测度论等工具，对假设空间$\mathcal{H}$建立如下依概率不等式结论：

$$\forall \varepsilon > 0, P(\exists f \in \mathcal{H}, GP \geqslant \varepsilon) \leqslant \frac{m(d_{\mathcal{H}})}{g(N) * h(\varepsilon)} \tag{1}$$

或者等价的

$$\forall \varepsilon > 0, P(\forall f \in \mathcal{H}, GP \leqslant \varepsilon) \geqslant 1 - \frac{m(d_{\mathcal{H}})}{g(N) * h(\varepsilon)} \tag{2}$$

其中$d_{\mathcal{H}}$的含义是假设空间的一个复杂度度量，如果$\mathcal{H}$是一个有限集合，则d可以是其元素个数，对于无限集合，我们后面会介绍他的一个复杂度度量VC Dimension ，N是观测到的数据量，ε是我们想要GP误差限，其中m，g，f都是一个多项式或者指数级别的函数。

也就是说根据我们的数据量，我们能以$1 - \frac{m(d_{\mathcal{H}})}{g(N) * h(\varepsilon)}$的概率把握把**GP**控制在$\varepsilon$以内。

1.3.3 Probability Approximate Correct Learnable（PAC可学习），Definition：

若假设$\mathcal{H}$空间对于真实映射F,存在$\hat{R}(f)$使得不等式（2）成立，则我们称F对于$\mathcal{H}$是**PAC Learnable**的（PAC可学习）。

注意！：

改概念不等价于**GP**依概率收敛到0！！！！！！！！！！！！！（依测度收敛到0只是必要条件）

这里比**GP**依概率收敛到0要求更强！！！！！

PAC Learnable GP 一定依概率收敛到0

GP依据概率收敛到0不一定PAC Learnable

重要的是一定要有一个和$d_{\mathcal{H}}$,N,ε有关的概率Bound，要能**控制。**

从统计的角度理解就是$\hat{R}(f)$是$R(f)$的弱相合统计量是**PAC Learnable**的一个必要条件。

有限假设集定理

定理1.3.4： 有限假设集原理

对于输入空间$\mathcal{X}$,和布尔输出空间$\mathcal{Y}=\{0，1\}$,我们的假设空间$\mathcal{H}$有限，即$\mathcal{H}=\{f_1,f_2,\ldots\ldots,f_d\}$。我们有：

$$\forall\varepsilon>0,P(\forall f\in\mathcal{H},GP\leqslant\varepsilon)\geqslant 1-\frac{d}{exp\{2N\varepsilon^2\}}$$

即有限假设空间对于任意布尔映射是**PAC Learnable。**

该证明需要用到**Hoeffding inequality**：

定理1.3.4.1 Hoeffding inequality（霍夫丁不等式）

$X_1,\cdots,X_n$ 为有界独立随机变量， 即$A_i\leq X_i\leq B_i$,$1\leq i\leq n$. 对于任意$\varepsilon>0$, 和任意$t>0$,

$$P\left(\sum_{i=1}^{n}(X_i-E[X_i])\geq\varepsilon\right)\leq\exp\left(-t\varepsilon+\frac{t^2}{8}\sum_{i=1}^{n}(B_i-A_i)^2\right)$$

进一步：

$$P\left(\sum_{i=1}^{n}(X_i-E[X_i])\geq\varepsilon\right)\leq\exp\left(-\frac{2\varepsilon^2}{\sum_{i=1}^{n}(B_i-A_i)^2}\right)$$

而要证明**Hoeffding inequality**我们先要需要证明高维统计如下几个引理：

引理1.3.4a：Markov inequality（马尔可夫不等式）

$$X\geqslant 0\ ,\forall\varepsilon>0\ ,P(x\geqslant\varepsilon)\leqslant\frac{1}{\varepsilon}EX.\quad .$$

proof:

$$EX=\int_0^{+\infty}xdF(x)\geqslant\int_\varepsilon^{+\infty}xdF(x)\geqslant\varepsilon\int_\varepsilon^{+\infty}dF(x)=\varepsilon P(x\geqslant\varepsilon).$$

$$\therefore P(x\geqslant\varepsilon)\leqslant\frac{1}{\varepsilon}EX.\quad .$$

定理1.3.4.1 Hoeffding inequality

proof:

我们考虑：

$$Y_i \triangleq X_i - EX_i \quad , EY_i = 0$$

可以看出：

$$a_i = A_i - EX_i \leqslant Y_i \leqslant b_i = B_i - EX_i$$

原问题等价：

$$P\left(\Sigma Y_i \geqslant \varepsilon\right) \leqslant \exp\left(-t\varepsilon + \frac{t^2}{8}\Sigma(b_i - a_i)^2\right)$$

考虑：

$$P\left(\Sigma Y_i \geqslant \varepsilon\right) = P\left(e^{t\Sigma Y_i} \geqslant e^{t\varepsilon}\right)$$

由**Markov inequality**：

$$P\left(e^{t\Sigma Y_i} \geqslant e^{t\varepsilon}\right) \leqslant e^{-t\varepsilon} \cdot E\left[e^{t\Sigma Y_i}\right]$$

因为Y_i独立：

$$P\left(e^{t\Sigma Y_i} \geqslant e^{t\varepsilon}\right) \leqslant e^{-t\varepsilon} \cdot \mathit{\Pi}_i^N E\left[e^{tY_i}\right]$$

又因为$a_i \leqslant Y_i \leqslant b_i$，

$$Y_i = (1-\alpha)a_i + \alpha bi，\alpha = \frac{Y_i - a_i}{b_i - a_i} \in [0.1]$$

因为e^t是凸的：

$$E\left[e^{tY_i}\right] \leqslant E[\frac{b_i - Y_i}{b_i - a_i}e^{ta_i} + \frac{Y_i - a_i}{b_i - a_i}e^{tb_i}]$$
$$E\left[e^{tY_i}\right] \leqslant \frac{b_i}{b_i - a_i}e^{ta_i} - \frac{a_i}{b_i - a_i}e^{tb_i}.$$

令$u = t\left(b_i - a_i\right) > 0, \quad \gamma = -\frac{a_i}{b_i - a_i} \Rightarrow \frac{b_i}{b_i - a_i} = 1 - \gamma$，得到：

$$-\frac{a_i}{b_i - a_i}e^{ta_i} + \frac{b_i}{b_i - a_i}e^{tb_i} = \gamma e^{(1-\gamma)u} + (1-\gamma)e^{-\gamma u} = e^{-\gamma u}\left(\gamma e^u + 1 - \gamma\right) \tag{3}$$

令$g(u) \triangleq \log(3) = -\gamma u + \log\left(\gamma e^u + 1 - \gamma\right)$,考虑0点泰勒展开：

$$g(0) = 0. \quad g'(u) = -\gamma + \frac{\gamma e^u}{\gamma e^u + 1 - \gamma}. \quad g'(0) = 0$$

$$g''(u) = \frac{\gamma e^u\left(\gamma e^u + 1 - \gamma\right) - \gamma e^\mu\left(\gamma e^u\right)}{\left(\gamma e^u + 1 - \gamma\right)^2} = \frac{(1-\gamma)\gamma e^u}{\left(\gamma e^u + 1 - \gamma\right)^2} \leqslant \frac{(1-\gamma)\gamma e^u}{\left(2\sqrt{\gamma e^u(1-\gamma)}\right)^2} = \frac{1}{4}$$

得到：

$$g(u) = g(0) + ug'(0) + \frac{u^2}{2}g''(\xi) \quad 0 \leqslant \xi \leqslant u$$

得到：

$$g(u) = \frac{u^2}{2}g''(\xi) \leqslant \frac{u^2}{8}.$$

得到

$$E\left[e^{tY_i}\right] \leqslant e^{g(u)} \leqslant e^{\frac{1}{8}u^2} = e^{\frac{t^2}{8}(b_i-a_i)^2}$$

得到：

$$\begin{aligned} P\left(\sum Y_i \geqslant \varepsilon\right) &\leqslant \exp\left(-t\varepsilon + \frac{t^2}{8}\sum\left(b_i-a_i\right)^2\right) \\ P\left(\sum Y_i \geqslant \varepsilon\right) &\leqslant \exp\left(-\frac{2\varepsilon^2}{\sum\left(b_i-a_i\right)^2}\right) \end{aligned}$$

得证。

Expend PS：

实际上**Hoeffding**只是更抽象不等式的一个特例，实际上指数型上界的概率不等式不止对有界独立变量成立，对于许多无界的分布也都成立，例如高斯分布，在高维统计中我们有专门研究一类具有可控概率界中心矩的分布（次高斯分布，次指数分布），**Bernstein**不等式等等就是用来描述这类过程的。这类不等式叫做**Concentration inequality**（集中不等式），描述的是样本数量朝着期望的收敛的一类概率bound，这类不等式原理在机器学习的learning theory和很多前沿随机过程问题中非常常见。

定理1.3.4 有限假设集原理

proof：

对任意函数 $f \in \mathcal{H}, \hat{R}(f)$ 是 N 个独立的随机变量 $L(Y, f(X)) + \varepsilon$的样本均值, $R(f)$是随机变量 $L(Y, f(X))$ 的期望，由**Hoeffding inequality**：

$$P(R(f) - \hat{R}(f) \geqslant \varepsilon) \leqslant \exp\left(-2N\varepsilon^2\right)$$

又因为$\mathcal{H} = \{f_1, f_2, \ldots\ldots, f_d\}$有限：

$$\begin{aligned} P(\exists f \in \mathcal{H} : R(f) - \hat{R}(f) \geqslant \varepsilon) &= P\left(\bigcup_{f \in \mathcal{H}}\{R(f) - \hat{R}(f) \geqslant \varepsilon\}\right) \\ &\leqslant \sum_{f \in \mathcal{H}} P(R(f) - \hat{R}(f) \geqslant \varepsilon) \\ &\leqslant d \exp\left(-2N\varepsilon^2\right) \end{aligned}$$

1.4VC Dimension（Vapnik-Chervonenkis Dimension）

1.4.3 Empirical processes via VC dimension:

$$E \sup_{f \in \mathcal{H}}\left|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f\left(X_i\right) - Ef(X)\right| \leq C\sqrt{\frac{\mathrm{vc}(\mathcal{H})_0}{n}}$$

$$R(f) - \hat{R}(f) \leq E\sup_{f \in \mathcal{H}}|R(f) - \hat{R}(f)| = E\sup_{f \in \mathcal{H}}\left|\frac{1}{n}\sum_{i}\left(f\left(X_i\right) - \mathbb{E}f\left(X_i\right)\right)\right| \leq C\sqrt{\frac{vc(\mathcal{H})}{n}}$$

1.5Uniform Convergence

1.6参数化假设空间

1.6.1参数化的假设空间,Definition：

f是由参数θ定义，$\theta \in \Theta$,参数化假设空间：

$$\mathcal{H} = \{f_\theta(x) | \theta \in \Theta\}$$

对于可观测到的N个点集——数据集$\{(x_i, y_i)\} \sim P(x, y)$,经验损失$\hat{R}(f)$:

$$L(\theta) = \hat{R}(f)$$