

ノンパラメトリックバウンドについて

情報理工学系研究科 数理情報学専攻
数理第四研究室 博士三年

指導教員： 駒木 文保 准教授

鈴木 大慈

2008年8月14日

発表の流れ

- 経験過程の一般論
 - ドンスカークラスの十分条件
 - 凸コスト最小化におけるノンパラメトリックバウンド
 - Tsybakovの低雑音条件

経験過程の理論 (一様大数の法則, 一様中心極限定理)

$$X_i \sim \text{i.i.d.}$$

$$Pf = E_P f, \quad P_n f = \frac{\sum_{i=1}^n f(X_i)}{n}$$

大数の法則

$$(P - P_n)f \xrightarrow{\text{a.s.}} 0$$

中心極限定理

$$\sqrt{n}(P - P_n)f \xrightarrow{\text{分布収束}} \text{正規分布}$$

d個の関数

$$\{f_j \mid j = 1, \dots, d\}$$

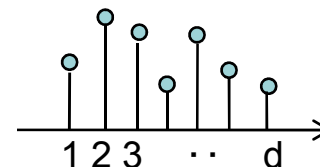
$$Pf = E_P f, \quad P_n f = \frac{\sum_{i=1}^n f(X_i)}{n}$$

大数の法則

$$\max_{1 \leq j \leq d} |(P - P_n)f_j| \longrightarrow 0$$

多変量中心極限定理

$$\sqrt{n}(P - P_n) \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_d \end{pmatrix} \longrightarrow \text{多変量正規分布}$$



無限(個)の関数

$$\mathcal{F} := \{f_\theta \mid \theta \in \Theta\}$$

$$Pf = \mathbb{E}_P f, \quad P_n f = \frac{\sum_{i=1}^n f(X_i)}{n}$$

一様大数の法則

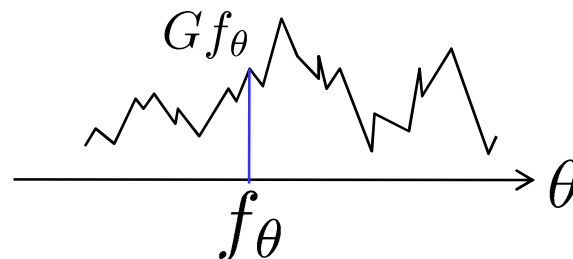
$$\sup_{f \in \mathcal{F}} |(P - P_n)f| \longrightarrow 0$$

一様中心極限定理

$$\sqrt{n}(P - P_n) \begin{pmatrix} \vdots \\ f_\theta \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$l^\infty(\mathcal{F})$ 上の分布
として分布収束

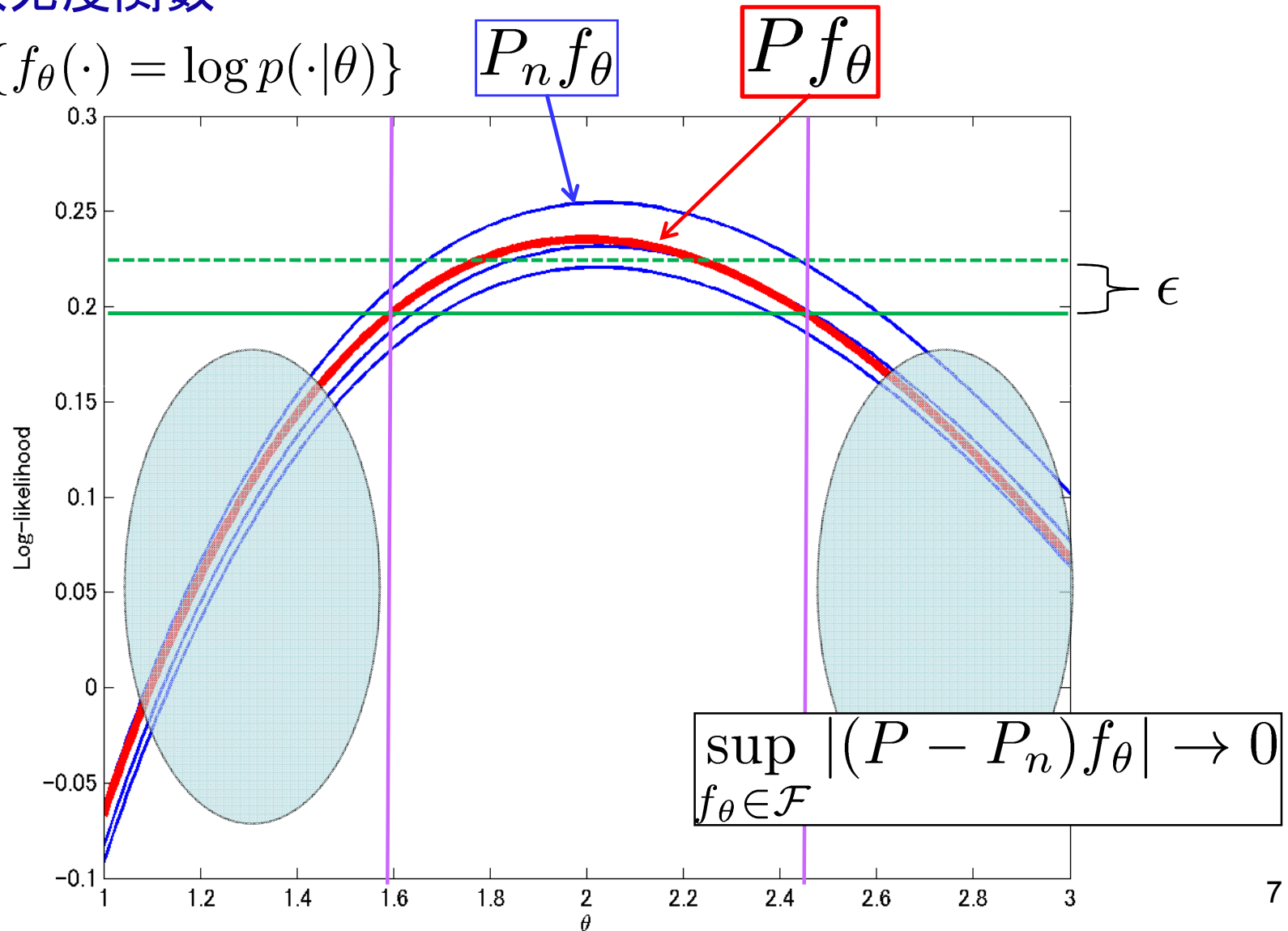
\longrightarrow **ガウシアンプロセス**



例：一様大数の法則

- 対数尤度関数

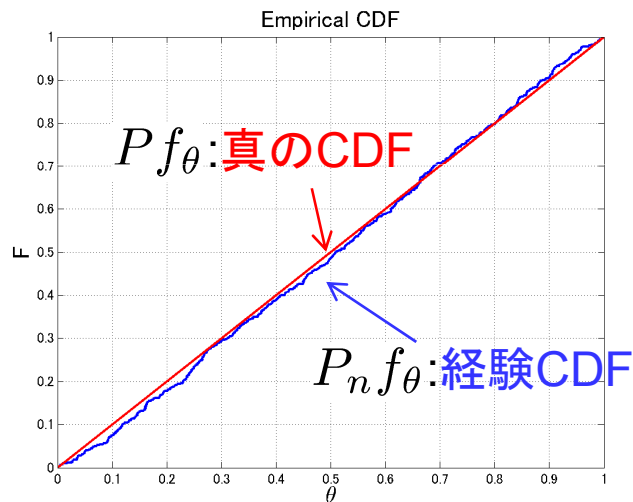
$$\mathcal{F} = \{f_\theta(\cdot) = \log p(\cdot|\theta)\}$$



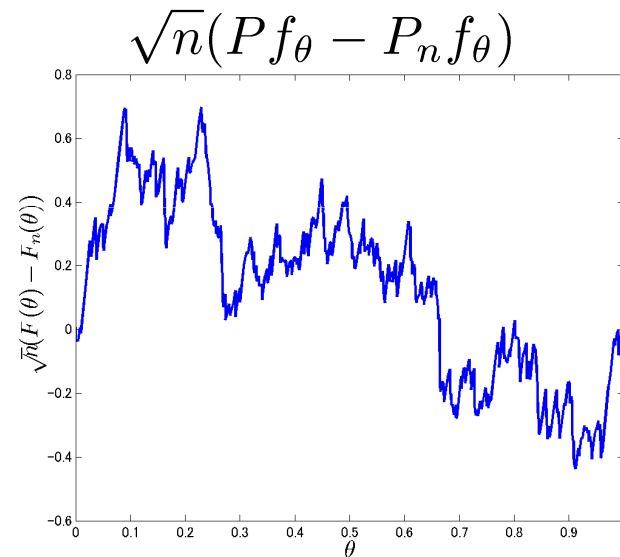
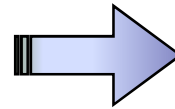
例：一樣中心極限定理

- 經驗累積分布関数

$$f_{\theta}(x) = \mathbf{1}\{x \leq \theta\} \quad (0 \leq \theta \leq 1)$$



一樣分布



經驗過程

(Kolmogorov-Smirnov検定)

- 以降, 一様中心極限定理が成り立つ関数族を考える.

※ 一様中心極限定理 → 一様大数の法則

- (P -)ドンスカークラス
 - 一様中心極限定理が成り立つ関数集合

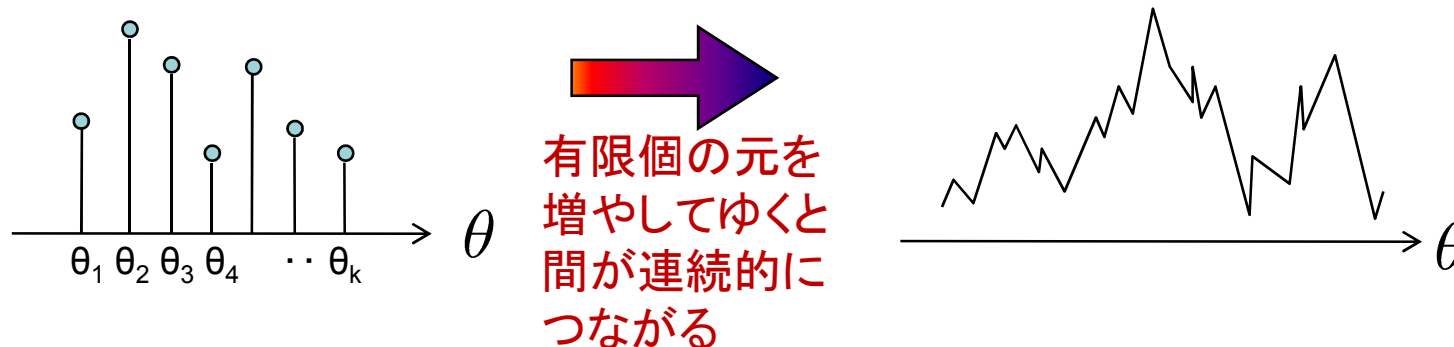
$$\sqrt{n}(P - P_n) \rightsquigarrow G \quad \text{in } l^\infty(\mathcal{F})$$

ドンスカーの必要十分条件

1. 有限個の元を任意に持ってきて,
その経験過程がある正規分布に収束する.

$$\sqrt{n}(P_n - P)(f_1, \dots, f_k) \rightsquigarrow N_k(0, \Sigma)$$

2. 有限個の元で \mathcal{F} をうまく近似できる
(漸近等連続性 \Leftrightarrow 漸近タイト)



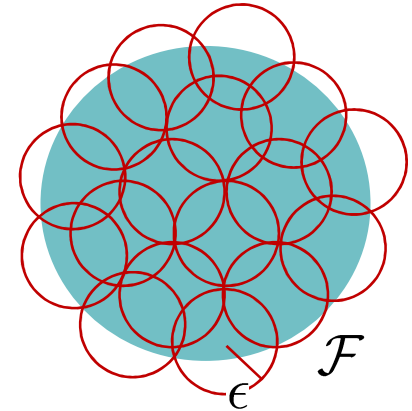
2. の十分条件

関数集合: \mathcal{F}

- 準備: 関数集合の複雑さ
 ϵ -カバリングナンバー

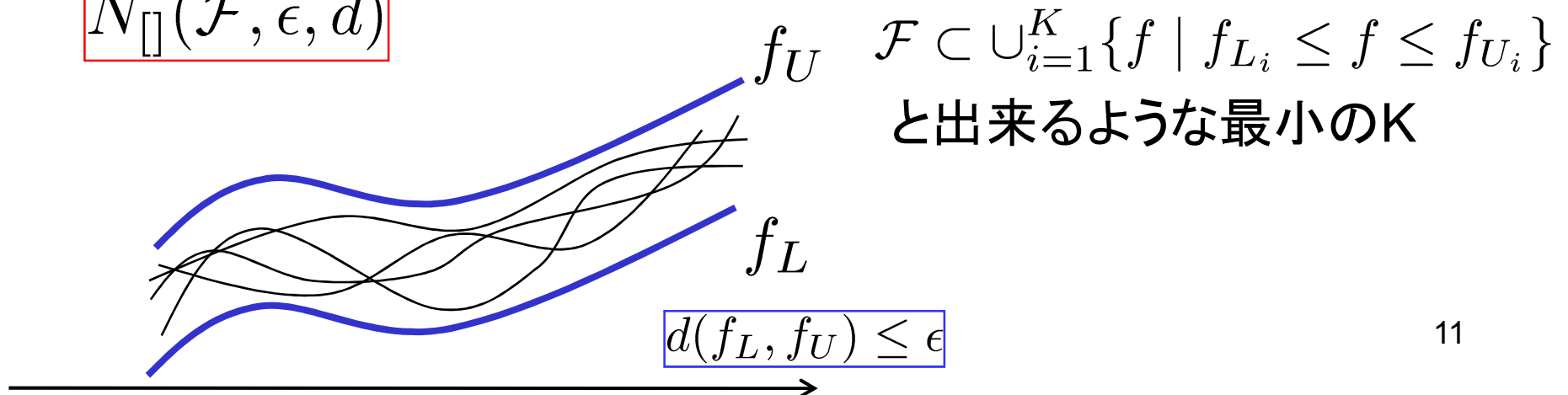
$$N(\mathcal{F}, \epsilon, d)$$

: ノルム d による ϵ -ボールで \mathcal{F} を覆うのに必要な最小のボールの個数



ϵ -ブラケットティングナンバー

$$N_{[]}(\mathcal{F}, \epsilon, d)$$



2. の十分条件

関数集合: \mathcal{F}

- 一様エントロピー条件

$$\int \sup_Q \sqrt{\log N(\mathcal{F}, \epsilon, L_2(Q))} d\epsilon < \infty$$

有限離散確率測度
の中でsupとる

または

$$\int \sqrt{\log N_{[]}(\mathcal{F}, \epsilon, L_2(P))} d\epsilon < \infty$$

Dudley積分という

カバリングナンバーの例

- d 次元, 有界

$$\mathcal{F} = \{f = \sum_{i=1}^d \alpha_i f_i \mid \|f\|_\infty \leq 1\}$$

$$\sup_Q N(\mathcal{F}, \epsilon, L_2(Q)) \leq \left(\frac{4 + \epsilon}{\epsilon} \right)^d$$

-
- VC次元 V , 有界

$$\sup_Q N(\mathcal{F}, \epsilon, L_2(Q)) \leq K_V \left(\frac{1}{\epsilon} \right)^{2(V-1)}$$

そのconvex hull

$$\sup_Q \log N(\mathcal{F}, \epsilon, L_2(Q)) \leq C_V \left(\frac{1}{\epsilon} \right)^{2(1-V^{-1})}$$

$$\rho = 1 - V^{-1}$$

カバリング/ ブラケットティングナンバーの例

- ガウスカーネルにより生成されるRKHSの単位球 (d次元, コンパクト集合上)

$$0 < \forall p < 2$$

$$\log N(B_H, \epsilon, \|\cdot\|_\infty) \leq c_{p,d} \sigma^{(1-p/4)d} \epsilon^{-p}$$

[Steinwart, Scovel: A.S. 2005]

- ソボレフ空間の単位球: α 階連続微分可能なd次元実数空間上の関数

$$\log N(C_1^\alpha, \epsilon, \|\cdot\|_\infty) \leq K \left(\frac{1}{\epsilon} \right)^{d/\alpha}$$

次元が高いほど複雑, 滑らかなほど単純

一様なバウンド

関数集合 \mathcal{F} の部分集合で二乗ノルムが δ 以下の集合

$$\mathcal{F}(\delta) := \{f \in \mathcal{F} \mid Pf^2 \leq \delta^2\}$$



$$E_P \left[\sup_{f \in \mathcal{F}(\delta)} |(P_n - P)f| \right] \leq \frac{C}{\sqrt{n}} \int_0^{\delta} \sup_Q \sqrt{\log N(\mathcal{F}, \epsilon, L_2(Q))} d\epsilon$$

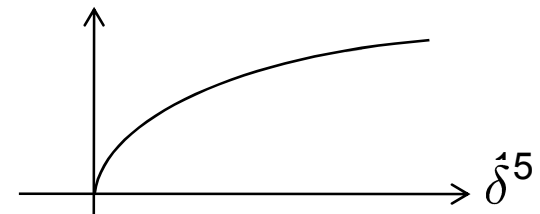
ブラケットでも似たような不等式が成り立つ

$$0 < \rho < 1$$

$$\sup_Q \log N(\mathcal{F}, \epsilon, L_2(Q)) \leq C\epsilon^{-2\rho}$$

の場合

$$\leq O\left(\frac{\delta^{1-\rho}}{\sqrt{n}}\right)$$



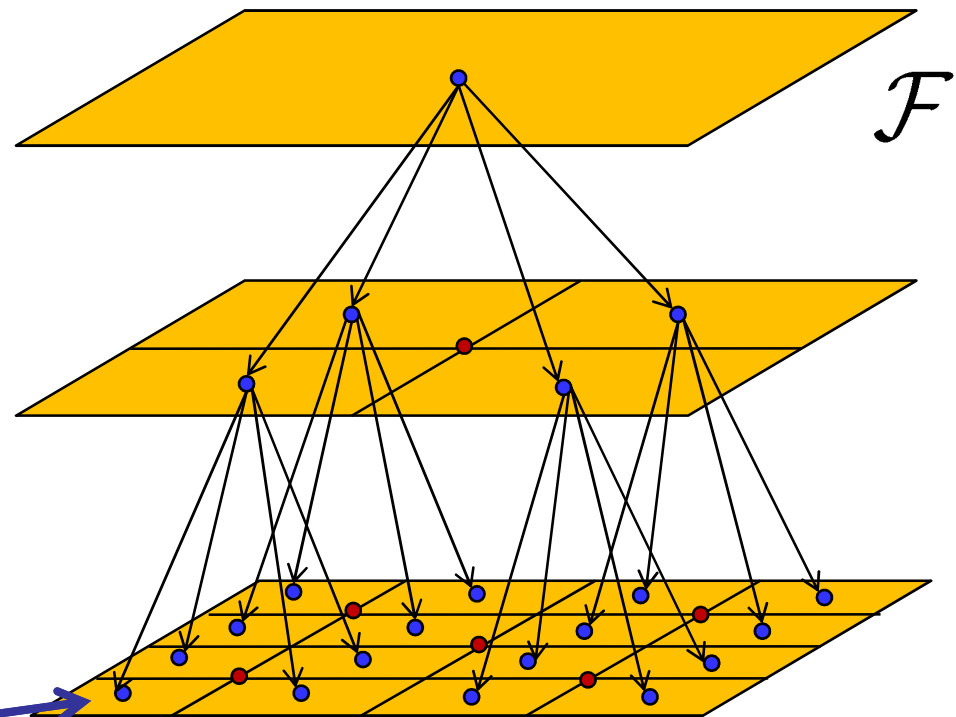
Dudley積分について

※ カバリングナンバーは関数集合 \mathcal{F} の複雑さを表す.

関数集合 \mathcal{F} を有限個の元で近似するのに必要な個数を表している.

積分は解像度を上げてゆくことに対応.

同じ ε -ボールの中に入っている元は高々 2ε の距離にある.



Dudley積分の雰囲気をつかむ

- Hoeffdingの不等式 → 一様カバリングナンバー

Z_i ($i = 1, \dots, n$) : 独立で期待値0の確率変数 s.t. $|Z_i| \leq m_i$

$$P\left(\frac{|\sum_{i=1}^n Z_i|}{\sqrt{n}} > x\right) \leq 2 \exp\left(-\frac{x^2}{2 \sum_{i=1}^n m_i^2 / n}\right)$$

- Bernsteinの不等式 → ブラケットティングナンバー

Z_i ($i = 1, \dots, n$) : 独立で期待値0の確率変数 s.t. $E|Z_i|^2 = v_i$, $|Z_i| \leq M$

$$P\left(\frac{|\sum_{i=1}^n Z_i|}{\sqrt{n}} > x\right) \leq 2 \exp\left(-\frac{x^2}{2(v + \frac{Mx}{\sqrt{n}})}\right)$$

$$\text{ただし, } v = \frac{\sum_{i=1}^n v_i}{n}$$

Maximal-Inequality 1

- Hoeffdingの不等式に対するMaximal-Ineq.

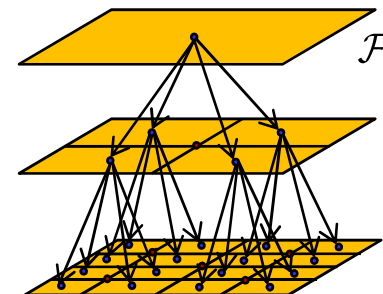
$\mathcal{F} := \{f_j \ (j = 1, \dots, m)\}$ 有限個の関数集合: どれも期待値0

$$P \left(\frac{|\sum_{i=1}^n f_j(X_i)|}{\sqrt{n}} > x \right) \leq 2 \exp \left(-\frac{x^2}{2\|f_j\|_\infty^2} \right)$$

Maximal Inequality

$$E \left(\max_{1 \leq j \leq m} \left| \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n f_j(X_i) \right| \right) \leq C \max_j \|f_j\|_\infty \sqrt{\log(1+m)}$$

これを, 解像度を細かくして
積分(チェイニング)したのがDudley積分



Maximal-Inequality2

- Bernsteinの不等式に対するMaximal-Ineq.

$\mathcal{F} := \{f_j \ (j = 1, \dots, m)\}$ 有限個の関数集合: どれも期待値0

$$P\left(\left|\frac{\sum_{i=1}^n f_j(X_i)}{\sqrt{n}}\right| > x\right) \leq 2 \exp\left(-\frac{x^2}{2(\|f_j\|_2^2 + \frac{\|f_j\|_\infty x}{\sqrt{n}})}\right)$$

Maximal Inequality

$$\begin{aligned} E\left(\max_{1 \leq j \leq m} \left|\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n f_j(X_i)\right|\right) \\ \lesssim \max_j \frac{\|f_j\|_\infty}{\sqrt{n}} \log(1+m) + \max_j \|f_j\|_2 \sqrt{\log(1+m)} \end{aligned}$$

バウンドを出してみる

設定

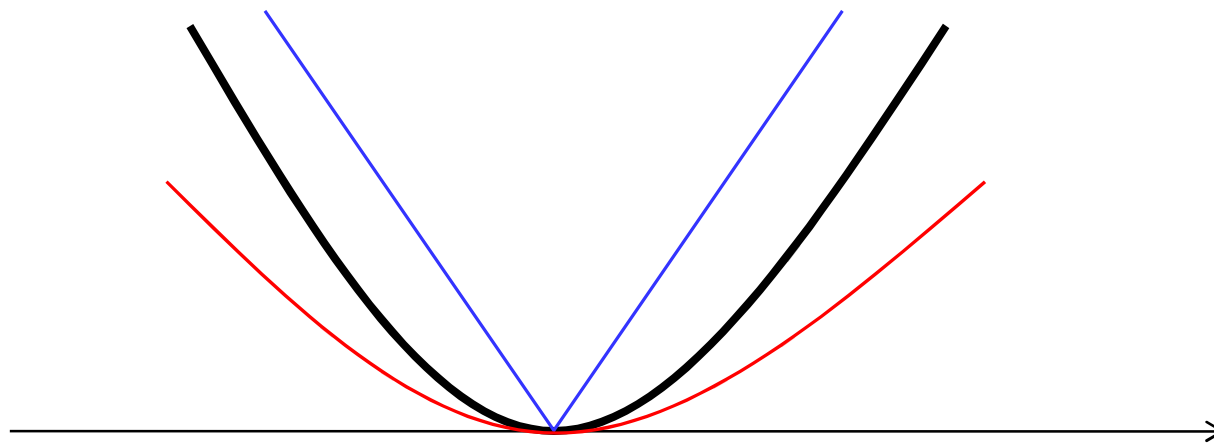
- 凸コスト最小化：正則化項なし

$$\min_{f \in \mathcal{F}} P[l(y, f(x))]$$

ロス関数 l の条件： $\forall y, u, v$

- リプシッツ連続 $|l(y, u) - l(y, v)| \leq L|u - v|$

- Modulus of convexity $c|u - v|^2 \leq \frac{l(y, u) + l(y, v)}{2} - l\left(y, \frac{u + v}{2}\right)$



f^* :最適解

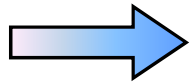
関数集合 \mathcal{F} の条件

1. 一様有界

$$\|f\|_{\infty} \leq M \quad (\forall f \in \mathcal{F})$$

2. 多項式複雑さ

$$0 < \exists \rho < 1, \quad \sup_Q \log N(\mathcal{F}, \epsilon, L_2(Q)) \leq C \epsilon^{-2\rho}$$



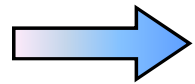
$\mathcal{G} := \{l(\cdot, f(\cdot)) - l(\cdot, f^*(\cdot)) \mid f \in \mathcal{F}\}$ とすると

リプシッツ連続性より

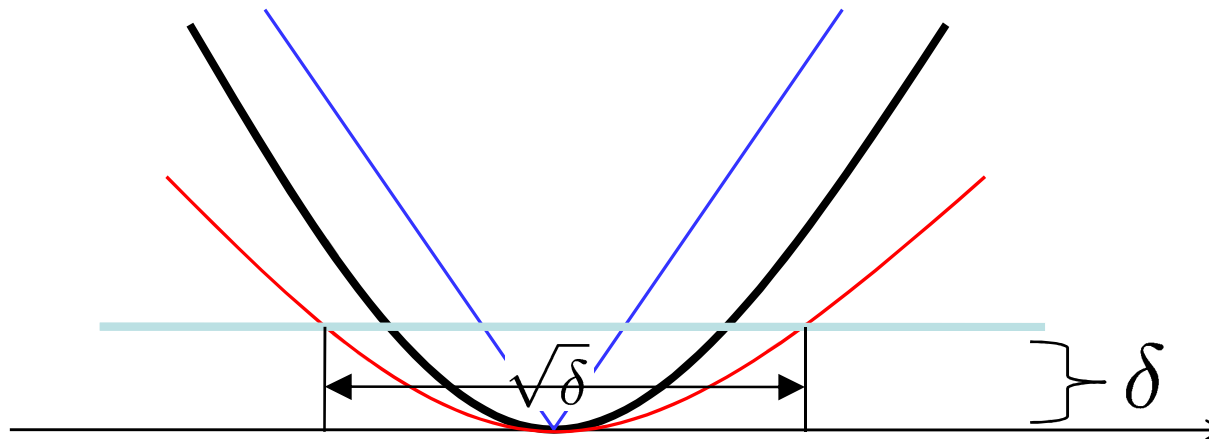
$$\sup_Q \log N(\mathcal{G}, \epsilon, L_2(Q)) \leq C' \epsilon^{-2\rho}$$

Modulus of convexity

$$cP(\hat{f} - f^*)^2 \leq P(l(\hat{f}) + l(f^*))/2 - Pl\left(\frac{\hat{f} + f^*}{2}\right) \leq P(l(\hat{f}) - l(f^*))/2$$



$$P(l(\hat{f}) - l(f^*))^2 \lesssim P(l(\hat{f}) - l(f^*))$$



$$\mathcal{G}(\delta) := \{g \in \mathcal{G} \mid \sqrt{Pg^2} \leq \delta\}$$

$$P(l(\hat{f}) - l(f^*))^2 \lesssim P(l(\hat{f}) - l(f^*))$$

$$= (P - P_n)(l(\hat{f}) - l(f^*)) + \underbrace{P_n(l(\hat{f}) - l(f^*))}_{\leq 0}$$

$$\leq (P - P_n)(l(\hat{f}) - l(f^*))$$

$$\leq \delta^2$$

$$l(\hat{f}) - l(f^*) \in \mathcal{G}(\delta)$$

$$\delta^2 = \frac{1}{\sqrt{n}} \delta^{1-\rho} \Rightarrow \delta = n^{-\frac{1}{2(1+\rho)}}$$

$$\mathbb{E} \left[\sup_{g \in \mathcal{G}(\delta)} |(P_n - P)g| \right] \leq \frac{C}{\sqrt{n}} \delta^{1-\rho}$$

$$P(l(\hat{f})) - P(l(f)) = O_p(n^{-\frac{1}{1+\rho}})$$

Talagrand's Concentration Inequality

$$P \left[\sup_{g \in \mathcal{G}(\delta)} (P_n - P)(g) \geq C \left(\mathbb{E} \left[\sup_{g \in \mathcal{G}(\delta)} (P_n - P)(g) \right] + \sqrt{\frac{t}{n}} \delta + \frac{t}{n} \right) \right] \leq e^{-t}$$

$$\sim \delta^2$$

$$\mathbb{E} \left[\sup_{g \in \mathcal{G}(\delta)} |(P_n - P)g| \right] \leq \frac{C}{\sqrt{n}} \delta^{1-\rho}$$

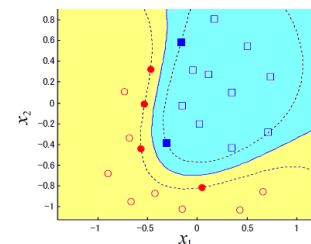
一様バウンド 23

Tsybakovの低雑音条件

Tsybakovの低雑音条件

\mathcal{X} : 入力変数の空間 $\mathcal{Y} = \{\pm 1\}$: 出力変数の空間

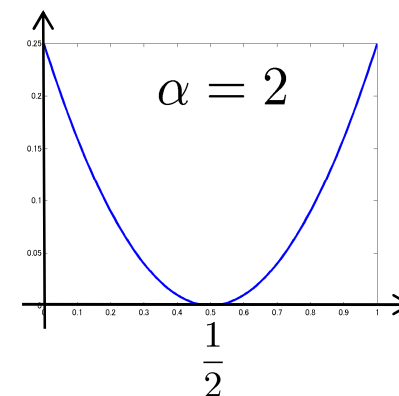
$P(X, Y)$ ($X \in \mathcal{X}, Y \in \{\pm 1\}$) : \mathcal{X}, \mathcal{Y} 上の確率分布



Tsybakovの低雑音条件 (Noise Exponent α)

$$\eta(X) := P(Y = 1|X)$$

$$\exists \alpha \geq 0 \quad P_X \left(\left| \eta(X) - \frac{1}{2} \right| \leq t \right) \leq C t^\alpha$$



$$\kappa = \frac{1 + \alpha}{\alpha} \quad \text{としておく}$$

二値判別・経験誤差最小化

N個のサンプル $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$

用いる判別機の集合(モデル) $\mathcal{F} : \mathcal{X} \rightarrow \{\pm 1\}$

$$f \in \mathcal{F}$$

経験リスク

$$\hat{R}(f) = \frac{\sum_{i=1}^N \mathbf{1}\{f(x_i) \neq y_i\}}{N}$$

経験リスク最小化

$$\hat{f} := \arg \min_{f \in \mathcal{F}} \hat{R}(f)$$

真のリスク (誤り確率)

$$R(f) = P(f(X) \neq Y)$$

真の最適解

$$f^* := \arg \min_{f \in \mathcal{F}} R(f)$$

$\sup_Q \log N(\mathcal{F}, \epsilon, L_2(Q)) \leq C' \epsilon^{-2\rho}$:モデル \mathcal{F} の複雑さは ρ ($0 \leq \rho \leq 1$)

$\arg \min_{f: \mathcal{X} \rightarrow \{\pm 1\}} R(f) = f^* \in \mathcal{F}$:真の解はモデルに含まれている

低雑音条件における汎化誤差

経験リスク最小化元の真のリスク

$$\begin{aligned} R(\hat{f}) - R(f^*) &= R(\hat{f}) - \hat{R}(\hat{f}) + \overbrace{\hat{R}(\hat{f}) - \hat{R}(f^*)}^{\leq 0} + \hat{R}(f^*) - R(f^*) \\ &\leq R(\hat{f}) - \hat{R}(\hat{f}) + \hat{R}(f^*) - R(f^*) = O_p(1/\sqrt{N}) \\ &\quad \xrightarrow{\text{経験過程の理論}} \underbrace{O_p(1/\sqrt{N})}_{\text{経験過程の理論}} + \underbrace{O_p(1/\sqrt{N})}_{\text{経験過程の理論}} \end{aligned}$$

しかし

Tsybakovの低雑音条件のもとでは

Fast Learning Rate

$$R(\hat{f}) - R(f^*) = O_p\left(N^{-\frac{\kappa}{2\kappa + \rho - 1}}\right)$$

➡ $O_p(1/\sqrt{n})$ より速い $\left(\frac{\kappa}{2\kappa + \rho - 1} = \frac{1}{2 - \frac{1-\rho}{\kappa}}\right)$

[Tsybakov: 2004, A.S.] ²⁷

論理の概要

Tsybakovの低雑音条件

→ $P(f - f^*)^2 \leq C_\alpha (R(f) - R(f^*))^{\frac{1}{\kappa}}$: リスクが低いなら, 真との距離も近い

$$\mathcal{F}(\delta) := \{f \mid P(f - f^*)^2 \leq \delta^2\}$$

一様なバウンド

$$E_P \left[\sup_{f \in \mathcal{F}(\delta)} |\hat{R}(f) - R(f) - (\hat{R}(f^*) - R(f^*))| \right] \leq C \left(\frac{\delta^{1-\rho}}{\sqrt{N}} \right)$$

→ $R(\hat{f}) - R(f^*) \leq \delta$ ならば $\hat{f} \in \mathcal{F}(\sqrt{C_\alpha} \delta^{\frac{1}{2\kappa}})$

すると高い確率で

$$R(\hat{f}) - R(f^*) \leq R(\hat{f}) - R_n(\hat{f}) - (R(f^*) - R_n(f^*)) \leq C \frac{1}{\sqrt{N}} \delta^{\frac{1-\rho}{2\kappa}}$$

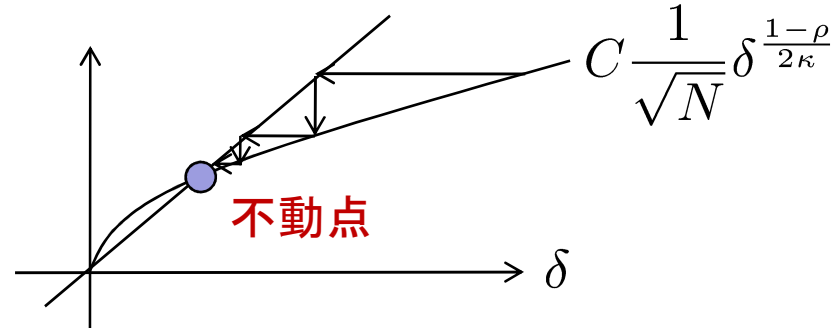
\hat{f} の最適性 一様バウンド

(cf: Talagrand's Concentration Inequality)

→ $\delta = 1$ から同じ論理を繰り返すと

$$\delta = \frac{1}{\sqrt{N}} \delta^{\frac{1-\rho}{2\kappa}}$$

$$\Rightarrow \delta = N^{-\frac{\kappa}{2\kappa + \rho - 1}}$$



$$\begin{aligned} R(\hat{f}) - R(f^*) &= R(\hat{f}) - \hat{R}(\hat{f}) + \hat{R}(\hat{f}) - \hat{R}(f^*) + \hat{R}(f^*) - R(f^*) \\ &\leq \boxed{R(\hat{f}) - \hat{R}(\hat{f})} + \boxed{\hat{R}(f^*) - R(f^*)} \end{aligned}$$

これらを別々に扱ってはいけない。
近いものは似た振る舞いをする。

終了