Apprentissage statistique

Chapitre 6 : Pertes générales, chaining

Lucie Le Briquer 6 mars 2018

Table des matières

1 Pertes générales

- Les données sont $X \in \mathcal{X}$ (le plus souvent $\subseteq \mathbb{R}^d$)
- Les étiquettes $Y \in [-1, 1]$
- On dispose de la famille \mathcal{F} de classifieurs $\subseteq \{x \in \mathcal{X} \longrightarrow [-1,1]\}$
- Perte (générale) : $l(f(x), y) \in [0, 1]$

Le risque de $f \in \mathcal{F}$ est :

$$R(f) = \mathbb{E}[l(f(X), Y)]$$

Exemple. (classiques de pertes) $l_p(y, y') = |y - y'|^p$

À partir des données $(X_1,Y_1),\ldots,(X_n,Y_n)$ on définit le risque empirique d'un classifieur par :

$$\hat{R}_n(f) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} l(f(X_i), Y_i)$$

Le minimiseur du risque empirique est $\hat{f}_n = \operatorname{argmin} \hat{R}_n(f)$ quand il est défini (ce qui sera toujours le cas désormais).

Lemme 1

$$R(\hat{f}_n) - \inf_{f \in \mathcal{F}} R(f) \leqslant 2 \sup_{f \in \mathcal{F}} |\hat{R}_n(f) - R(f)|$$

et,

$$\mathbb{P}\left(\sup_{f\in\mathcal{F}}|\hat{R}_n(f)-R(f)|\geqslant \mathbb{E}\left[\sup_{f\in\mathcal{F}}|\hat{R}_n(f)-R(f)|\right]+\varepsilon\right)\leqslant e^{-2n\varepsilon^2}$$

Preuve.

Ce n'est pas Hoeffding puisqu'on aurait :

$$\mathbb{P}(|\hat{R}_n(f) - R(f)| - \mathbb{E}[\hat{R}_n(f) - R(f)] \geqslant \varepsilon) \leqslant e^{-2n\varepsilon^2}$$

Et donc on aurait seulement $\leq |\mathcal{F}|e^{-2n\varepsilon^2}$.

Notons $Z_n = \sup_{f \in \mathcal{F}} |\hat{R}_n(f) - R(f)|$. On veut montrer que $\mathbb{P}(Z_n - E[Z_n] \geqslant \varepsilon) \leqslant e^{-2\varepsilon^2 n}$.

$$Z_n = \sup_{f \in \mathcal{F}} \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l(f(X_i), Y_i) - \mathbb{E}[l(f(X), Y)] \right|$$

Si on change la valeur d'un seul (X_i, Y_i) en maintenant les autres égaux, alors la valeur de Z_n change d'au plus $\frac{1}{n}$. Inégalité de McDiarmid (ou des différences bornées) :

$$\mathbb{P}(Z_n - \mathbb{E}[Z_n] \geqslant \varepsilon) \leqslant e^{-\frac{2\varepsilon^2}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{n^2}}} = e^{-2\varepsilon^2 n}$$

Exemple. (intéressant d'utilisation de McDarmid) Concentration de la variance empirique. Soient X_1, \ldots, X_n i.i.d. de variance σ^2 .

$$\hat{\sigma}_n^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X_n})^2 = \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i < j} (X_i - X_j)^2$$

McDiarmid donne:

$$\mathbb{P}(\hat{\sigma}_n^2 - \sigma^2 \geqslant \varepsilon) \leqslant e^{-\frac{n\varepsilon^2}{2}}$$

Pour en revenir au learning, il suffit de contrôler $\sup_{f \in \mathcal{F}} |\hat{R}_n(f) - R(f)|$. En utilisant la symétrisation, on va simplifier son écriture.

Lemme 2

$$\mathbb{E}\left[\sup_{f\in\mathcal{F}}|\hat{R}_n(f)-R(f)|\right]\leqslant 2\sup_{\mathcal{D}_n}\mathbb{E}_{\sigma}\left[\sup_{f\in\mathcal{F}}\left|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n\sigma_i l(f(x_i),y_i)\right|\right]$$

où les $\sigma_i = \pm 1$ avec probabilité $\frac{1}{2}$, i.i.d. et indépendantes des (X_i, Y_i) .

Preuve. (idées)

On introduit un "échantillon fantôme" (X_i', Y_i') de même loi de (X_i, Y_i) et indépendant. On remplace R(f) par $\mathbb{E}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n l(f(X_i'), Y_i')\right]$. La fin de la preuve est presque identique au cas binaire.

Définition 1 (complexité de Rademacher) -

La complexité de Rademacher pour la famille \mathcal{F} au point \mathcal{D}_n est :

$$\mathcal{R}[l \circ \mathcal{F}, \mathcal{D}_n] = \mathbb{E}_{\sigma} \left[\sup_{f \in \mathcal{F}} \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sigma_i l(f(x_i), y_i) \right| \right]$$

et on notera

$$\mathcal{R}_n[l \circ \mathcal{F}] = \sup_{\mathcal{D}_n} \mathcal{R}[l \circ \mathcal{F}, \mathcal{D}_n]$$

Lemme 3

Si \mathcal{F} est finie, alors par Hoeffding:

$$\mathcal{R}_n[l \circ \mathcal{F}] \leqslant \sqrt{\frac{2\log(|\mathcal{F}|)}{n}}$$

1.1 Cas général, \mathcal{F} infinie

On veut ε -approcher les fonctions croissantes à valeurs dans [0,1]. $\forall f$ croissante $\exists f_{\varepsilon} \in \mathcal{F}^{\varepsilon} \forall i, |f(x_i) - f_{\varepsilon}(x_i)| \leq \varepsilon$. Il y a $\frac{1}{\varepsilon}$ sauts (de hauteur ε) à "placer" sur un des n points. Donc au plus $n^{1/\varepsilon}$.

Par ailleurs si l est L-lipschitz,

$$\mathcal{R}_n[l \circ \mathcal{F}] \leqslant \varepsilon + \mathcal{R}_n[l \circ \mathcal{F}^{\varepsilon}]$$

Donc dans le cas des fonctions croissantes on obtiendrait :

$$\mathcal{R}_n[l \circ \mathcal{F}] \leqslant \varepsilon + 2\sqrt{\frac{\log(n)}{\varepsilon n}} \leqslant 3\left(\frac{\log n}{n}\right)^{\frac{1}{3}}$$

Pour simplifier les notations, on va considérer la compexité de Rademacher :

$$\mathcal{R}_n[\mathcal{F}, \mathcal{D}_n] = \mathbb{E}_{\sigma} \left[\sup_{f \in \mathcal{F}} \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sigma_i f(x_i) \right| \right]$$

Pour une classe \mathcal{F} de fonctions $\mathcal{X} \longrightarrow [0,1]$.

- **Définition 2** (covering number) —

Étant donnés une classe $\mathcal{F} \subset \{\mathcal{X} \longrightarrow [0,1]\}$, une métrique d sur $\{\mathcal{X} \longrightarrow [0,1]\}$ et $\varepsilon > 0$. Un ε -net de (\mathcal{F},d) est un ensemble V tel que pour tout $f \in \mathcal{F}$, il existe $g \in V$ tel que $d(f,g) \leqslant \varepsilon$ (les éléments de V n'appartiennent pas forcément à \mathcal{F}).

Les covering numbers de (\mathcal{F}, d) sont :

$$\mathcal{N}(\mathcal{F}, d, \varepsilon) = \inf\{|V| ; V \text{ est un } \varepsilon - \text{net de } (\mathcal{F}, d)\}$$

En particulier pour les distances d_p^x définies par :

$$d_p^x(f,g) = \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n |f(x_i) - g(x_i)|^p\right)^{1/p}$$

On notera

$$\sup_{x_1,...,x_n} \mathcal{N}(\mathcal{F}, d_p^x, \varepsilon) = \mathcal{N}_n^p(\mathcal{F}, \varepsilon)$$

Théorème 1 (discrétisation)

$$\mathcal{R}_n[\mathcal{F}, \mathcal{D}_n] \leqslant \inf_{\varepsilon > 0} \varepsilon + \sqrt{\frac{2\log(2\mathcal{N}(\mathcal{F}, d_1^x, \varepsilon))}{n}}$$

et

$$\mathcal{R}_n[\mathcal{F}] \leqslant \inf_{\varepsilon > 0} \varepsilon + \sqrt{\frac{2\log(2\mathcal{N}_n^1(\mathcal{F}, \varepsilon))}{n}}$$

Exemples.

• Si \mathcal{F} est l'ensemble des fonctions croissantes de \mathbb{R} dans [0,1],

$$\mathcal{R}_n[\mathcal{F}] \leqslant 3 \left(\frac{\log(n)}{n}\right)^{1/3}$$

• Si \mathcal{F} est l'ensemble des fonctions linéaires $\theta^T x$ avec $c\theta \in \mathcal{B}_p$ (sur $\mathcal{X} = \mathcal{B}_q$), alors :

$$\mathcal{N}(\mathcal{F}, \varepsilon) \leqslant \left(\frac{2}{\varepsilon}\right)^d$$
 et $\mathcal{R}_n[\mathcal{F}] \leqslant 2\sqrt{\frac{d \log(16n/d)}{n}}$

2 Chaining

Théorème 2

Si $f \in \mathcal{F}$ sont à valeurs dans [0,1], alors, pour tout $x = (x_1, \dots, x_n)$,

$$\mathcal{R}_n[\mathcal{F}, x] \le 4 \inf_{\varepsilon > 0} \left\{ \varepsilon + 3 \int_{\varepsilon}^1 \sqrt{\frac{\log(2\mathcal{N}(\mathcal{F}, d_1^x, \varepsilon'))}{n}} d\varepsilon' \right\}$$

Preuve.

Fixons $x = (x_1, \dots, x_n)$ de telle sorte que f peut être identifiée par $(f(x_1), \dots, f(x_n))$.

$$\mathcal{R}_n[\mathcal{F}, x] \leqslant \mathbb{E}_{\sigma} \sup_{f} |\sigma^T f|$$
 où $\sigma = \left(\frac{\sigma_1}{n}, \dots, \frac{\sigma_n}{n}\right)$

On note V_m un 2^{-m} —net de \mathcal{F} qui réalise $\mathcal{N}(\mathcal{F}, d_1^x, 2^{-m})$ et f_m un élément de V_m qui est à 2^{-m} de f. On écrit tout simplement :

$$f = (f_M - f_{M-1}) + (f_{M-1} - f_{M-2}) + \dots + (f_1 - 0) + \underbrace{(f - f_M)}_{\leq 2^{-M}}$$

Donc

$$\mathcal{R}_{n}[\mathcal{F}, x] \leq \mathbb{E}_{\sigma} \sup_{f} \left| \sigma^{T} \left[(f - f_{M}) + (f_{M} - f_{M-1}) + \dots + (f_{1} - 0) \right] \right|$$

$$\leq 2^{-M} + \sum_{m=1}^{M} \mathbb{E} \sup_{f_{m}, f_{m-1}} \left| \sigma^{T} (f_{m} - f_{m-1}) \right|$$

Il reste à contrôler pour tout $m \leq M$:

$$\mathbb{E}\sup_{f_m,f_{m-1}}|\sigma^T(f_m-f_{m-1})|$$

car par Hoeffding:

$$\mathbb{P}(\sigma^T g \geqslant \varepsilon) \leqslant e^{-\frac{2n^2\varepsilon^2}{\sum_{g_i^2}^2}} = e^{-\frac{2n^2\varepsilon^2}{\|g\|^2}}$$

Donc,

$$\mathbb{P}\left(\sup_{g\in G}\sigma^Tg\geqslant\varepsilon\right)\leqslant |G|e^{-\frac{2n^2\varepsilon^2}{\max\|g\|^2}}$$

Ainsi, ici:

$$\mathbb{E} \sup_{f_m, f_{m-1}} |\sigma^T (f_m - f_{m-1})| \leq \sup_{f} ||f_m - f_{m-1}||_2 \frac{\sqrt{2 \log(2|V_m||V_{m-1}|)}}{n}$$

$$\leq \sup_{f} ||f_m - f_{m-1}||_2 \frac{\sqrt{2 \log(2|V_m|^2)}}{n}$$

mais,

$$||f_m - f_{m-1}||_2 \le ||f_m - f||_2 + ||f - f_{m-1}||_2$$

$$\le \sqrt{n}(||f_m - f||_1 + ||f - f_{m-1}||_1)$$

$$\le \sqrt{n}(2^{-m} + 2^{-m+1}) = 3\sqrt{n}2^{-m}$$

D'où:

$$\mathcal{R}_n[\mathcal{F}, x] \le 2^{-M} + 3 \sum_{m=1}^{M} 2^{-m} \sqrt{\frac{2 \log(2|V_m|^2)}{n}}$$

Avec $V_m = \mathcal{N}(\mathcal{F}, d_1^x, 2^{-m})$. En choisissant M tel que $2^{-M-2} \leqslant \varepsilon 2^{-M-1}$, on obtient :

$$\mathcal{R}_n[\mathcal{F}, x] \leqslant 4\varepsilon + 12 \int_{\varepsilon}^{1} \sqrt{\frac{2\log(2\mathcal{N}(\mathcal{F}, d_1^x, \varepsilon'))}{n}} d\varepsilon'$$

$$\operatorname{car} \sum_{m=1}^{M} 2^{-m} \sqrt{\dots} = 2 \sum_{m=1}^{M} \left(2^{-m} - 2^{-(m+1)} \right) \sqrt{\dots}$$

Exemples. Si $\mathcal{N}(\mathcal{F}, d^x, \varepsilon \approx n^{1/\varepsilon})$ alors :

$$\int_{\varepsilon}^{1} \sqrt{\frac{\log(2n^{1/\varepsilon'})}{n}} d\varepsilon' \leqslant \sqrt{2} \int_{\varepsilon}^{1} \sqrt{\frac{\log n}{n}} \frac{1}{\varepsilon'} d\varepsilon' \leqslant 2\sqrt{2} \sqrt{\frac{\log n}{n}} \quad \forall \varepsilon$$

Donc $\mathcal{R}_n[\mathcal{F}, x] \leqslant 36\sqrt{\frac{\log n}{n}}$.

3 Calculs de covering numbers

On veut majorer les coverings numbers.

Technique 1. On peut relier covering et packing numbers.

$$\mathcal{N}(\mathcal{F}, d, \varepsilon) = \text{nombre de boules minimal pour recouvrir } \mathcal{F}$$

 $\mathcal{M}(\mathcal{F}, d, \varepsilon) = \text{nombre maximal de points } f_i \text{ dans } \mathcal{F} \text{ tel que } |f_i - f_j| > \varepsilon$

- Proposition 1 —

 $\forall \varepsilon, \forall \mathcal{F}, \ \forall d:$

$$\mathcal{M}(\mathcal{F}, d, 2\varepsilon) \leqslant \mathcal{N}(\mathcal{F}, d, \varepsilon) \leqslant \mathcal{M}(\mathcal{F}, d, \varepsilon)$$

Preuve.

Pour la seconde inégalité, on remarque qu'un ensemble qui réalise $\mathcal{M}(\mathcal{F},d,\varepsilon)$ est un ε -covering. Pour la première inégalité, considérons la contraposée. Supposons $\mathcal{M} \geqslant \mathcal{N} + 1$. Alors il existe une boule de taille ε qui contient deux points du packing optimal. Donc ces deux points sont à une distance de plus de 2ε . Contradiction.

Technique 2. Utiliser le volume.

Proposition 2

$$\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)^d \frac{\operatorname{Vol}(\mathcal{F})}{\operatorname{Vol}(\mathcal{B})} \leqslant \mathcal{N}(\mathcal{F}, d, \varepsilon) \leqslant \mathcal{M}(\mathcal{F}, d, \varepsilon) \leqslant \left(\frac{3}{\varepsilon}\right)^d \frac{\operatorname{Vol}(\mathcal{F})}{\operatorname{Vol}(\mathcal{B})}$$

si $\mathcal{F} \subset \mathbb{R}^d$ et est convexe, \mathcal{B} est la boule unité.

Preuve.

$$\mathcal{F} \subset \bigcup_{f_i \in \mathcal{F}} \mathcal{B}(f_i, \varepsilon)$$

Donc,

$$\operatorname{Vol}(\mathcal{F}) \leqslant \operatorname{Vol}\left(\bigcup_{f_i \in \mathcal{F}} \mathcal{B}(f_i, \varepsilon)\right) \leqslant \sum_{f_i \in \mathcal{F}} \operatorname{Vol}(\mathcal{B}(f_i, \varepsilon)) = \mathcal{N} \operatorname{Vol}(\mathcal{B}) \varepsilon^d$$

D'un autre côté,

$$\mathcal{M} \times \operatorname{Vol}(\mathcal{B}) \left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^d \leqslant \operatorname{Vol}\left(\mathcal{F} + \frac{\varepsilon}{2}\mathcal{B}\right) \leqslant \operatorname{Vol}\left(\frac{3}{2}\mathcal{F}\right) = \left(\frac{3}{2}\right)^2 \operatorname{Vol}(\mathcal{F})$$

en supposant que $Vol(\mathcal{F}) \geqslant Vol(\varepsilon \mathcal{B})$.

Technique 2. "Fat-shattering", généralise la VC-dimension.

Définition 3

Étant donnés x_1, \ldots, x_n , on dit que \mathcal{F} éclate x_1, \ldots, x_n au niveau α , s'il existe des seuils s_1, \ldots, s_n tels que $\forall E \subset \{1, \ldots, n\}$, il existe $f_E \in \mathcal{F}$:

$$f_E(x_i) \geqslant s_i + \alpha \quad \text{si } i \in E$$

$$f_E(x_i) \leqslant s_i - \alpha \quad \text{si } i \notin E$$

 $\operatorname{fat}_{\alpha}(\mathcal{F})$ est la plus petite cardinalité d'un ensemble pouvant être éclaté au niveau α .

Proposition 3

$$\log(\mathcal{N}(\mathcal{F}, d_{\infty}, \alpha)) \leqslant \operatorname{fat}_{\frac{\alpha}{4}} \log \left(\frac{2en}{d\alpha} \right) \log \left(2n \left(1 + \frac{2}{\alpha} \right)^{2} \right) \approx \operatorname{fat}_{\frac{\alpha}{4}}(\mathcal{F}) \log^{2} \left(\frac{n}{d\alpha} \right)$$