Learning Theory

@author Jimmy

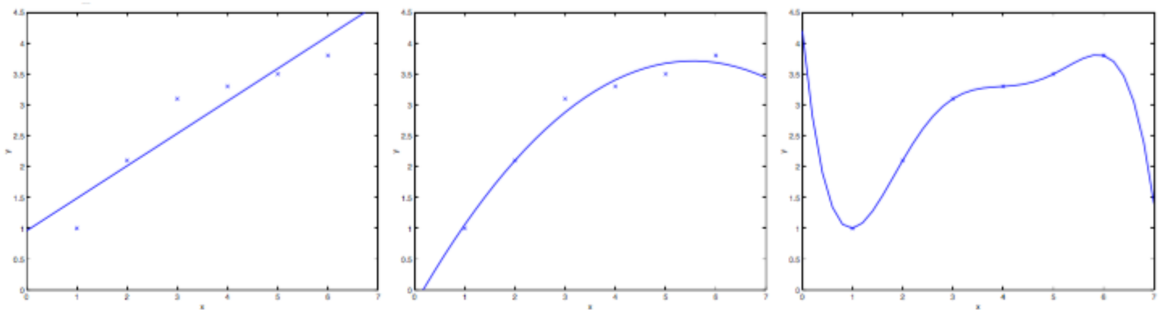
2016年3月6日

简介

截止目前，我们已经讨论了几种常用的机器学习算法，了解了它们学习的步骤。但机器学习的应用背景是多种多样的，做实际工程必须学会如何根据具体的问题评估一个学习模型的好坏，了解如何合理地选择模型、提取特征和对参数调优。通过学习learning theory，我们能够获得一些指导性的结论。

1 偏差\方差权衡

当我们在讨论线性回归时，用来拟合数据的模型可能简单如$y = \theta_0 + \theta_1 x$，或许复杂点如$y = \theta_0 + \theta_1 x + \cdots + \theta_5 x^5$。在以下例子中，我们可以看到不同的模型对相同数据的拟合图形。



最左边的图是一次模型，中间的图是二次模型，最右边的图是五次模型。在这些模型中，我们希望得到第二个，因为它既能够描述训练数据的规律，又具有很好的泛化能力（指的是学习到的模型对位置数据预测的能力，是学习方法本质上的重要性质）。一次模型对大多数数据都不能够正确拟合，这种情况称为欠拟合（underfitting），这样的模型偏差（bias）很大；五次模型虽然100%拟合了训练数据，但是模型过于灵活，并不能很好的预测未知数据，这种情况称为过拟合（overfitting），这样的模型方差（variance）很大。在这里我无法给出偏差和方差的准确定义，不过总体而言，简单模型偏差较大，复杂模型方差较大，为了得到较小的一般误差，我们需要对模型的复杂程度有所把控，对偏差和方差做出权衡。

2 基础知识

learning theory是用来帮助我们在面对不同场景时更好的应用学习算法的理论，它研究的是一些我们在实际应用中经常面对的问题：

1. 我们该如何对偏差和方差如何用公式统一起来，以方便我们定量的权衡?
2. 在机器学习中我们关注的是模型的一般误差（generalization error），它衡量的是模型预测表现的好坏，但是大部分的学习算法都是在训练集上进行的，那么我们应该如何将训练集和一般误差联系起来?
3. 我们能否证明在满足某些条件时，学习算法的表现最好?

为了给出这些问题的答案，让我们先从两个简单但非常有用的引理说起。

引理2.1（联合边界）：令$A_1, \cdots, A_k$是k个不同的事件（不一定相互独立），那么有

$$P(A_1 \cup \cdots \cup A_k) \leq p(A_1) + \cdots + p(A_k)$$

这个引理是概率论的内容，无需多说。

引理2.2（Hoeffding不等式）：令$Z_1, \cdots, Z_m$是m个独立同分布（independent and identically distributed, iid）的随机变量，且服从参数为ϕ的Bernoulli分布。令$\hat{\phi} = (1/m)\sum_{i=1}^{m} Z_i$，$\gamma > 0$为一个常数，那么有

$$P\left(\left|\phi - \hat{\phi}\right| > \gamma\right) \leq 2\exp(-2\gamma^2 m)$$

这个引理在learning theory中也称为Chernoff边界，它给出了用Bernoulli随机变量均值来估计参数ϕ的误差上界。这句话好拗口，意思就是Bernoulli分布的参数ϕ与其估计值$\hat{\phi}$（所有变量的平均值，这些变量服从以ϕ为参数的Bernoulli分布）之间的误差有上界。可以看到，当m取值很大时误差大于γ的概率接近于0，这也是误差上界的意义所在。

利用这两个引理我们可以证明learning theory领域里的许多重要结论。接下来我们将介绍几个概念，为了描述上的方便，我们

将研究的范围限制为二分类问题，其中目标变量$y \in \{0, 1\}$。

给定训练集$S = \left\{\left(x^{(i)}, y^{(i)}\right); i = 1, \cdots, m\right\}$，假设样本$\left(x^{(i)}, y^{(i)}\right)$独立同分布，且服从于分布$\mathcal{D}$。对于一个模型假设$h$，我们定义训练误差（在learning theory中也称为经验误差）为

$$\hat{\epsilon}(h) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} 1\left\{h\left(x^{(i)}\right) \neq y^{(i)}\right\}$$

当我们想明确指出训练误差对训练集S的依赖关系时，我们也会把它写成$\hat{\epsilon}_S(h)$。我们定义一般误差为

$$\epsilon(h) = P_{(x,y)\sim\mathcal{D}}\left(h(x) \neq y\right)$$

它的含义是服从$\mathcal{D}$分布的新样本(x, y)被错误分类的概率。假设我们采用了线性分类模型，且假设$h_\theta(x) = 1\{\theta^T x \geq 0\}$，我们学习参数$\theta$的一种方式是最小化训练误差，然后选择

$$\hat{\theta} = \arg\min_{\theta} \hat{\epsilon}(h_\theta)$$

作为学习的结果，我们称这个过程为经验风险最小化（empirical risk minimization, ERM）。接下来，让我们从具体的参数和问题中抽离出来，将学习参数的过程转变成学习模型的过程。定义假设类$\mathcal{H}$是被用于学习的分类器的集合，那么ERM可以视作为在一系列函数集$\mathcal{H}$上进行最小化的过程，这时我们取

$$\hat{h} = \arg\min_{h\in\mathcal{H}} \hat{\epsilon}(h)$$

作为训练集上的最优假设，因为$\hat{h}$的训练误差最小。

3 有限假设类

令假设类$\mathcal{H} = \{h_1, \cdots, h_k\}$中包含k（k不等于无穷）个假设，其中$h_i : \mathcal{X} \mapsto \{0, 1\}; i = 1, \cdots, k$，且我们通过ERM学习到假设$\hat{h}$。本节接下来的内容是按以下两个部分进行的:

1. 证明训练误差$\hat{\epsilon}(h)$是一般误差$\epsilon(h)$的一个可靠估计
2. 证明$\hat{h}$的一般误差$\epsilon(\hat{h})$有上界

取任意确定的假设$h_i \in \mathcal{H}$，并且定义$Z_j = 1\{h_i\left(x^{(j)}\right) \neq y^{(j)}\} \in \{0, 1\}$。$Z_j$表达的是$h_i$是否对样本$\left(x^{(j)}, y^{(j)}\right)$分类错误，且分类错误的概率为$p(Z_j = 1) = \epsilon(h_i)$。（注：由于随机变量$Z$满足$Z = 1\{h_i(x) \neq y\}$，故$E(Z) = P_{(x,y)\sim\mathcal{D}}\left(h_i(x) \neq y\right) = \epsilon(h_i)$，又显然有$Z \sim$ Bernoulli，故$p(Z_j = 1) = \epsilon(h_i)$。）此时，训练误差为

$$\hat{\epsilon}(h_i) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^{m} Z_j$$

应用Hoeffding不等式得

$$P\left(|\epsilon(h_i) - \hat{\epsilon}(h_i)| > \gamma\right) \leq 2\exp(-2\gamma^2 m)$$

对于确定的h_i，当m很大时，训练误差和一般误差非常接近（准确来讲是两者差值的超过γ的概率很小），对任意$h \in \mathcal{H}$会得到什么结论呢？令A_i表示事件$|\epsilon(h_i) - \hat{\epsilon}(h_i)| > \gamma$，我们已经证明了对任意确定的$A_i$，$P(A_i) \leq 2\exp(-2\gamma^2 m)$结果为真，由联合边界引理得

$$\begin{aligned}
P\left(\text{exist } h \in \mathcal{H}. |\epsilon(h_i) - \hat{\epsilon}(h_i)| > \gamma\right) &= P(A_i \cup \cdots A_k) \\
&\leq \sum_{i=1}^{k} P(A_i) \\
&\leq \sum_{i=1}^{k} 2\exp(-2\gamma^2 m) \\
&= 2k\exp(-2\gamma^2 m)
\end{aligned}$$

也就是说

$$P\left(\text{not } h \in \mathcal{H}. |\epsilon(h_i) - \hat{\epsilon}(h_i)| > \gamma\right) \geq 1 - 2k\exp(-2\gamma^2 m)$$

这个结论称为一致收敛（uniform convergence），因为它对任意$h \in \mathcal{H}$都成立。在上述的讨论中，给定m, γ可得概率

$P(h \in \mathcal{H}, |\epsilon(h) - \hat{\epsilon}(h)| > \gamma)$的关系式。我们可得到此关系式的变形形式。

例如，给定γ和$\delta > 0$，我们需要多大的样本才有$P\left(\text{any } h \in \mathcal{H}. |\epsilon(h_i) - \hat{\epsilon}(h_i)| \leq \gamma\right) \geq 1 - \delta$（关系式*）？要让关系式*成立满足$\delta \geq 2k\exp(-2\gamma^2 m)$即可，解得

$$m \geq \frac{1}{2\gamma^2}\log\frac{2k}{\delta}$$

这个结论告诉我们不论我们想让训练误差和一般误差多接近（γ足够小），我们都可以通过控制训练集的大小或者说为样本复杂度（sample complexity）来达到这一点，本节开头的part1得证。

再例如，给定m, δ，要使关系式*成立，γ需满足

$$|\epsilon(h) - \hat{\epsilon}(h)| \leq \gamma \leq \sqrt{\frac{1}{2m}\log\frac{2k}{\delta}}$$

记$h^* = \text{argmin}_{h\in\mathcal{H}}\epsilon(h)$为假设类中的最优假设，那么

$$\begin{aligned}
\epsilon(\hat{h}) &\leq \hat{\epsilon}(\hat{h}) + \gamma \\
&\leq \hat{\epsilon}(h^*) + \gamma \\
&\leq \epsilon(h^*) + 2\gamma
\end{aligned}$$

下面让我们将目前得到的所有结论综合到我们的定理3.1中。

定理3.1：令$|H| = k$，且m, δ为任意常数，那么关系式*成立的充分条件是

$$\epsilon(\hat{h}) \leq \left(\min_{h\in\mathcal{H}}\epsilon(h)\right) + 2\sqrt{\frac{1}{2m}\log\frac{2k}{\delta}}$$

这个定理给出了$\epsilon(\hat{h})$的上界，本节part2得证。现在让我们回过头讨论在模型选择中的偏差/方差权衡。假设我们已有一个假设类$\mathcal{H}$，并考虑选择一个更大的假设类$\mathcal{H}' \supseteq \mathcal{H}$（更大意味着次数更高）。如果我们使用假设类$\mathcal{H}'$，那么上式第一项会减小（在更大的假设函数集中寻求最小化），也就是说通过学习更大的假设类，偏差会减小；然而，这时候由于假设数目k增大，上式的第二项会增大，也就是说学习更大的假设类会使方差增大。

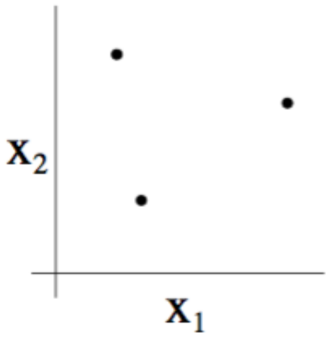
推论：令$|H| = k$，且δ, γ为任意常数，那么$P\left(\epsilon(\hat{h}) \leq \min_{h\in\mathcal{H}}\epsilon(h) + 2\gamma)\right) \geq 1 - \delta$的充分条件是

$$\begin{aligned}
m &\geq \frac{1}{2\gamma^2}\log\frac{2k}{\delta} \\
&= O(\frac{1}{\gamma^2}\log\frac{k}{\delta})
\end{aligned}$$

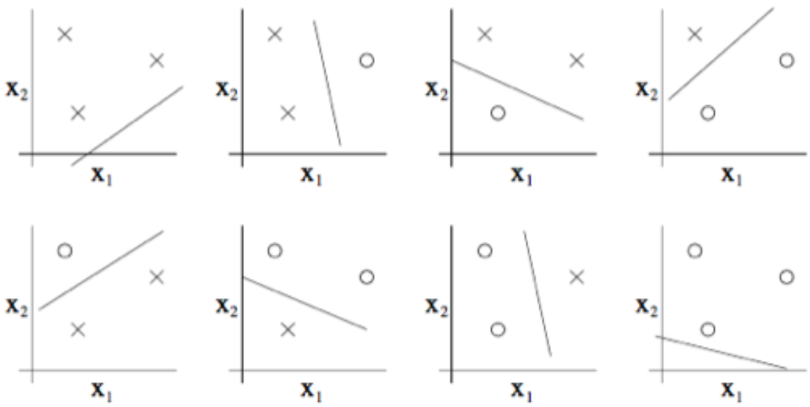
4 无限假设类

在真实情况下，假设类里包含的假设是无穷的，在这种情况下我们能不能得到与有限假设类相似的结论？在开始介绍之前，让我们给出一些定义。

1. 给定集合$S = \{x^{(i)}, \cdots, x^{(d)}\}$（与训练集无关），其中点$x^{(i)} \in \mathcal{X}$，如果$\mathcal{H}$能够划分$S$的任意一种分布，我们就说$\mathcal{H}$划分了$\mathcal{S}$。
2. 给定一个假设类$\mathcal{H}$，我们定义它的VC维（Vapnik-Chervonenkis dimension）为它所能够划分的最大的集合的大小（即集合所包含点的数目），写作$VC(\mathcal{H})$。



对上图所示的大小为3的集合S，二维线性分类器（$h(x)=1\{\theta_0+\theta_1x_1+\theta_2x_2\geq 0\}$）集合$\mathcal{H}$能够划分吗？答案是可以，以下展示的就是就是$\mathcal{H}$如何对$S$进行划分的。



事实上，在二维空间上的假设类$\mathcal{H}$所能划分的最大集合大小为3，也就是说$VC(\mathcal{H})=3$（并非任何大小为3的集合都能被二维假设类）；更一般地，对于n维假设类$\mathcal{H}$有，$VC(\mathcal{H})=n+1$。

下面给出在learning theory领域可能最重要的定理。

定理4.1：给定$\mathcal{H}$，且$d=VC(\mathcal{H})$，那么关系式*成立需满足对所有$h\in\mathcal{H}$有

$$|\epsilon(h)-\hat{\epsilon}(h)|\leq O\left(\sqrt{\frac{d}{m}\log\frac{m}{d}+\frac{1}{m}\log\frac{1}{\delta}}\right)$$

并且

$$\epsilon(\hat{h})\leq\epsilon(h^*)+O\left(\sqrt{\frac{d}{m}\log\frac{m}{d}+\frac{1}{m}\log\frac{1}{\delta}}\right)$$

这说明，当一个假设类的VC维有限时，如果m很大也会得到一致收敛结论。

推论：关系式*成立的充分条件是$m=O_{\gamma,\delta}(d)$。

这里大O表示对常数γ,δ依赖的时间复杂度。