作业 2：学习理论

清华大学软件学院
机器学习, 2024 年秋季学期

1 介绍

本次作业需要提交说明文档（PDF 形式）。注意事项如下：

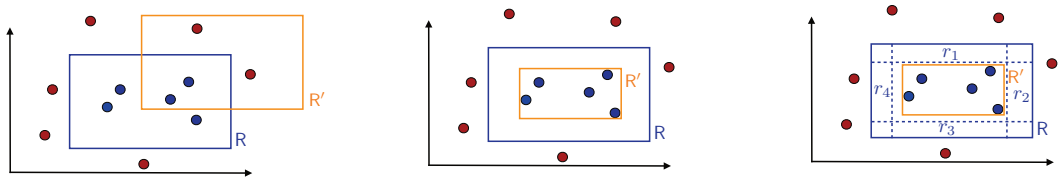
- 本次作业**总分值为 110 分**，若得分超过 100 分，则按照 100 分截断。
- 作业按点给分，因此请在说明文档中按点回答，方便助教批改。
- 友情提示：即使无法完成某一小题，该题结论也可以作为后面小题的条件。
- **对于证明题而言，需要说清楚重要（不）等式或引理的名字**，例如“利用 sup 的次可加性”，“利用 2.3 题的结论”等。如果**手写作业请务必保证字迹清晰**。
- 不要使用他人的作业，也不要向他人公开自己的作业，否则处罚很严厉，会扣至-100（倒扣本次作业的全部分值）。**发现疑似抄袭将采用口试等方式进行查证**。
- 统一文件的命名：{学号}_{姓名}_hw2.pdf

2 概率近似正确（Probably Approximately Correct）（35pt）

课件给出了 PAC 学习的一般框架，本题会介绍一个具体的实例——轴对齐矩形学习问题，来帮助你更好地理解 PAC 学习理论。

如图1(a)所示，轴对齐矩形[1]学习问题的**输入**空间是二维平面上的所有点，即 $x \in \mathcal{X} = \mathbb{R}^2$；**标签** $y \in \mathcal{Y} = \{0, 1\}$，即平面上的点被分成正例（$y = 1$）或负例（$y = 0$）。大小为 n 的**训练样本集** $\mathcal{D}_n = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ 由分布 $D_{\mathcal{X}\times\mathcal{Y}}$ 独立同分布（i.i.d.）采样生成。具体地，x 独立同分布服从 $D_{\mathcal{X}}$，标签 y 关于输入 x 的条件分布由某个未知的轴对齐矩形 R 决定：$\Pr[y = 1|x] = \mathbb{I}[x \in \mathrm{R}]$，即所有正例点必然落在 R 内部，而所有负例点必然落在该矩形外部。为方便起见，下文中我们将输入 $x \sim D_{\mathcal{X}}$ 落在任一矩形 R 内的概率记作 $\Pr[\mathrm{R}]$。

[1]边和坐标轴平行的矩形



(a) (b) (c)

图 1: **(a)** 目标矩形 R 和可能的矩形 R′。圆点表示训练样本点，蓝色的圆点表示正例，红色的圆点表示负例。**(b)** 算法返回的矩形 $\mathrm{R}' = \mathrm{R}_{\mathcal{D}_n}$ 必然在 R 内部。**(c)** 沿着矩形区域 R 的四条边，构造的四个新的矩形区域 r_1，r_2，r_3 和 r_4。

该学习问题定义为：给定训练集 $\mathcal{D}_n \sim D^n_{\mathcal{X}\times\mathcal{Y}}$[2]，找到一个**期望误差**

$$\mathcal{E}(\mathrm{R}') = \mathbb{E}_{x\sim D_{\mathcal{X}}}\left[\mathbb{I}[x \in \mathrm{R}] \neq \mathbb{I}[x \in \mathrm{R}']\right]$$

足够小的矩形 R′。从图1(a)中可以看出，R′ 的误差 $\mathcal{E}(\mathrm{R}')$ 对应的区域包括：在矩形 R′ 内但在矩形 R 外的区域（假阳性），在矩形 R 内但在矩形 R′ 外（假阴性）。接下来我们会逐步证明轴对齐矩形学习问题是 PAC-可学习的。

基于对数据生成分布 $D_{\mathcal{X}\times\mathcal{Y}}$ 的先验知识，我们令**假设空间** $\mathcal{H}$ 是 $\mathbb{R}^2$ 中所有轴对齐矩形的集合：$\mathcal{H} = \{\mathrm{R} = [l, r] \times [b, t] \mid l \le r,\ b \le t\}$。我们给出以下**学习算法** $\mathcal{A}$：给定大小为 n 的训练集 $\mathcal{D}_n$，返回包含 $\mathcal{D}_n$ 中所有正例点的最小的轴对齐矩形 $\mathrm{R}' = \mathrm{R}_{\mathcal{D}_n}$（见图1(b)）。显然，该算法不会产生假阳性，误差 $\mathcal{E}(\mathrm{R}_{\mathcal{D}_n})$ 对应的区域必定在矩形 R 内。

固定 $\epsilon > 0$，不妨假设 $\Pr[\mathrm{R}] > \epsilon$（当 $\Pr[\mathrm{R}] \le \epsilon$ 时，很容易证明 PAC-可学习的条件）。沿着矩形区域 R 的四条边，分别构造四个新的矩形区域 r_1，r_2，r_3 和 r_4（见图1(c)），使得其与 R 的一条边重合，且是概率 $\Pr[r_i] \ge \epsilon/4$ 的最小矩形。例如 $r_4 = [l, s_4] \times [b, t]$ 与矩形 R 的左边重合，满足 $s_4 = \inf\{s : \mathbb{P}[[l, s] \times [b, t]] \ge \epsilon/4\}$。

1. 证明如果误差 $\mathcal{E}(\mathrm{R}_{\mathcal{D}_n})$ 大于 ϵ，那么 $\mathrm{R}_{\mathcal{D}_n}$ 必然和某个 r_i 不重叠，即

$$\{\mathcal{E}(\mathrm{R}_{\mathcal{D}_n}) > \epsilon\} \subset \bigcup_{i=1}^{4} \{\mathrm{R}_{\mathcal{D}_n} \cap r_i = \emptyset\}$$

   提示：使用反证法。(5pt)

2. 计算矩形 $\mathrm{R}_{\mathcal{D}_n}$ 和给定区域 r_i 没有任何重叠的概率

$$\Pr_{\mathcal{D}_n\sim D^n}\left[\{\mathrm{R}_{\mathcal{D}_n} \cap r_i = \emptyset\}\right]$$

   尽可能紧的上界。提示：用 ϵ 和 n 表示。(5pt)

[2]下文中简记为 D^n

3. 计算矩形 $\mathrm{R}_{\mathcal{D}_n}$ 和 r_1，r_2，r_3 和 r_4 中的某一个没有重叠区域的概率

$$\Pr_{\mathcal{D}_n \sim D^n}\left[\cup_{i=1}^{4}\{\mathrm{R}_{\mathcal{D}_n} \cap r_i = \emptyset\}\right]$$

尽可能紧的上界。提示：使用 union bound。(5pt)

4. 证明：

$$\Pr_{\mathcal{D}_n \sim D^n}\left[\mathcal{E}(\mathrm{R}_{\mathcal{D}_n}) > \epsilon\right] \leq 4\exp\left(-n\epsilon/4\right)$$

提示：对于任意 $x \in \mathbb{R}, 1 - x \leq e^{-x}$ 成立。(5pt)

5. 证明：$\mathbf{R}^2$ 上所有轴对齐矩阵组成的假设空间 $\mathcal{H}$ 是 PAC-可学习的。提示：用 PAC-可学习的定义。(5pt)

实际当中的数据集都是存在噪音的。考虑以下情况：平面上的所有的负例点（$y = 0$）的标签都保持不变 $y' = 0$，所有的正例点（$y = 1$）的标签以概率 $\eta \in (0, \frac{1}{2})$ 变成 $y' = 0$，以 $1 - \eta$ 的概率仍然为 $y' = 1$。对于学习算法而言，η 是未知的。假设其上界 η' 是已知的，即 $\eta \leq \eta' \leq 1/2$。学习算法依然返回包含 $\mathcal{D}_n$ 中所有正例点（$y' = 1$）的最小的轴对齐矩形。

6. 计算此时矩形 $\mathrm{R}_{\mathcal{D}_n}$ 和给定区域 r_i 没有任何重叠的概率

$$\Pr_{\mathcal{D}_n \sim D^n}\left[\{\mathrm{R}_{\mathcal{D}_n} \cap r_i = \emptyset\}\right]$$

尽可能紧的上界。提示：用 ϵ，η' 和 n 表示。(5pt)

7. 给出当存在噪音时，$\Pr_{\mathcal{D}_n \sim D^n}\left[\mathcal{E}(\mathrm{R}_{\mathcal{D}_n}) > \epsilon\right]$ 的上界，并证明此时 $\mathcal{H}$ 依然是 PAC-可学习的。(5pt)

3 集中不等式（10pt）

取值在 {1, 2, ..., K} 的 $X_1, X_2, \ldots, X_n$ 是服从 Multinoulli 分布的独立随机变量，$\Pr[X_i = k] = p_k$，参数 $\boldsymbol{p} = (p_1, \ldots, p_K)$ 满足 $p_k \geq 0, \sum p_k = 1$。我们可以使用经验分布 $\hat{\boldsymbol{p}} = (\hat{p}_1, \ldots, \hat{p}_K)$：

$$\hat{p}_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{I}[X_i = k], \quad k = 1, 2, \ldots, K$$

来估计 $\boldsymbol{p}$。求证：对任意 $\delta > 0$，以至少 $1 - \delta$ 的概率，

$$\|\boldsymbol{p} - \hat{\boldsymbol{p}}\|_\infty = \max_k |p_k - \hat{p}_k| \leq \sqrt{\frac{1}{2n} \log \frac{2K}{\delta}}$$

提示：使用 Hoeffding 不等式或者 McDiarmid 不等式。

4 有限假设空间的泛化界（15pt）

假设 D 是定义在 $\mathcal{X}$ 上的一个数据分布，$f : \mathcal{X} \to \{+1, -1\}$ 是打标函数（labeling function）。定义分布 D 上的标签偏置 p_+ 为：

$$p_+ = \Pr_{x \sim D}[f(x) = +1].$$

定义 S 是从分布 D 独立同分布采样出的一个大小为 n 的数据集。我们可以使用 $\hat{p}_+ = \frac{1}{n} \sum_{x \in S} \mathbb{I}[f(x) = +1]$。求证：对于任意 $\delta > 0$，$|p_+ - \hat{p}_+| \leq \sqrt{\frac{\log(2/\delta)}{2n}}$ 成立的概率至少为 $1 - \delta$。

提示：参考课件中对有限假设空间的泛化误差界的推导，使用 Hoeffding 不等式进行证明即可。

5 无限假设空间的泛化界（50pt）

5.1 Rademacher 复杂度

往年考试题。

1. 定义只包含两个函数的函数族 $\mathcal{G} = \{g_{-1}, g_{+1}\}$，其中 g_{-1} 是恒取 -1 的常数函数，g_{+1} 是恒取 $+1$ 的常数函数，$S = (z_1, z_2, ..., z_m)$ 是从分布 $\mathcal{D}$ 采样的大小为 m 的数据集。请直接给出 $\mathcal{G}$ 的 VC 维，并推导 Rademacher 经验复杂度 $\hat{\mathcal{R}}_S(\mathcal{G})$ 的上界。（10pt）

   提示：对于凸函数 f，$f(\mathbb{E}[X]) \leq \mathbb{E}[f(X)]$。（Jensen 不等式）

2. 定义函数族 $\mathcal{G}$: $\mathcal{Z} \to [0,1]$，课件中对于 Rademacher 复杂度的上界推导是基于对函数 $\Phi(S) = \sup_{g\in\mathcal{G}}(\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[g] - \hat{\mathbb{E}}_S[g])$ 的分析，其中 $S = (z_1, z_2, ..., z_m)$ 是从分布 $\mathcal{D}$ 采样的大小为 m 的数据集，$\hat{\mathbb{E}}_S[g] = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} g(z_i)$。

   在本题中你将再次使用 McDiarmid 不等式，基于对函数 $\Psi(S) = \sup_{g\in\mathcal{G}}(\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[g] - \hat{\mathbb{E}}_S[g] - 2\hat{\mathcal{R}}_S(\mathcal{G}))$ 的分析，推导出 Rademacher 复杂度更紧的上界。要求给出完整证明，以及使用概率近似正确框架表述最终的结论。(15pt)

   提示：课件上已经证明了 $\mathbb{E}_S[\Phi(S)] \leq 2\mathcal{R}_m(\mathcal{G})$，该条件可直接使用。

5.2 增长函数

定义从 $\mathbf{R}$ 映射到 $\{+1, -1\}$ 的阈值函数族 $\mathcal{H} = \{x \to \mathbb{I}[x \geq \theta] | \theta \in \mathbf{R}\} \cup \{x \to \mathbb{I}[x \leq \theta] | \theta \in \mathbf{R}\}$，请求出函数族 $\mathcal{H}$ 的增长函数，并导出 $\mathcal{R}_n(\mathcal{H})$ 的上界。(10pt)

提示：可以直接使用课件上的结论。

5.3 VC 维

与第2题中的*轴对齐矩阵学习*问题类似，我们考虑*凸 d 边形学习*问题。设假设空间 $\mathcal{H} = \{\mathbb{I}[x \in P] | P \text{ is a convex d-gon}\}$ 是二维平面 $\mathbf{R}^2$ 上所有凸 d 边形分类函数的集合。证明：$\mathcal{H}$ 的 VC 维是 $2d + 1$。(不考虑数据中存在三点共线的情况)(15pt)

提示 1：通过举例的方式给出下界，再证明上界；用文字和图形表述即可。

提示 2：考虑点是否都排列在同一个凸多边形上，进行分类讨论。