机器学习算法系列（18）：方差偏差权衡（Bias-Variance Tradeoff）

一、定义

1.1 感性解释

Bias和Variance是针对Generalization（泛化、一般化）来说的。在机器学习中，我们用训练数据集学习一个模型，我们通常会定义一个损失函数（Loss Function），然后将这个Loss（或者叫error）的最小化过程，来提高模型的性能（performance）。然而我们学习一个模型的目的是为了解决实际的问题（即将训练出来的模型运用于预测集），单纯地将训练数据集的Loss最小化，并不能保证解决更一般的问题时模型仍然是最优的，甚至不能保证模型是可用的。这个训练数据集的Loss与一般化的数据集（预测数据集）的Loss之间的差异就叫做Generalization error。

而Generalization error又可以细分为Random Error、Bias和Variance三个部分。

首先需要说的是随机误差。它是数据本身的噪声带来的，这种误差是不可避免的。

其次如果我们能够获得所有可能的数据集合，并在这个数据集合上将Loss最小化，这样学习到的模型就可以称之为“真实模型”，当然，我们是无论如何都不能获得并训练所有可能的数据的，所以真实模型一定存在，但无法获得，我们的最终目标就是去学习一个模型使其更加接近这个真实模型。

Bias和Variance分别从两个方面来描述了我们学习到的模型与真实模型之间的差距（除去随机误差）。

Bias描述的是对于测试数据集，“用所有可能的训练数据集训练出的所有模型的输出预测结果的期望”与“真实模型”的输出值（样本真实结果）之间的差异。简单讲，就是在样本上拟合的好不好。要想在bias上表现好，low bias，就是复杂化模型，增加模型的参数，但这样容易过拟合(overfitting)。

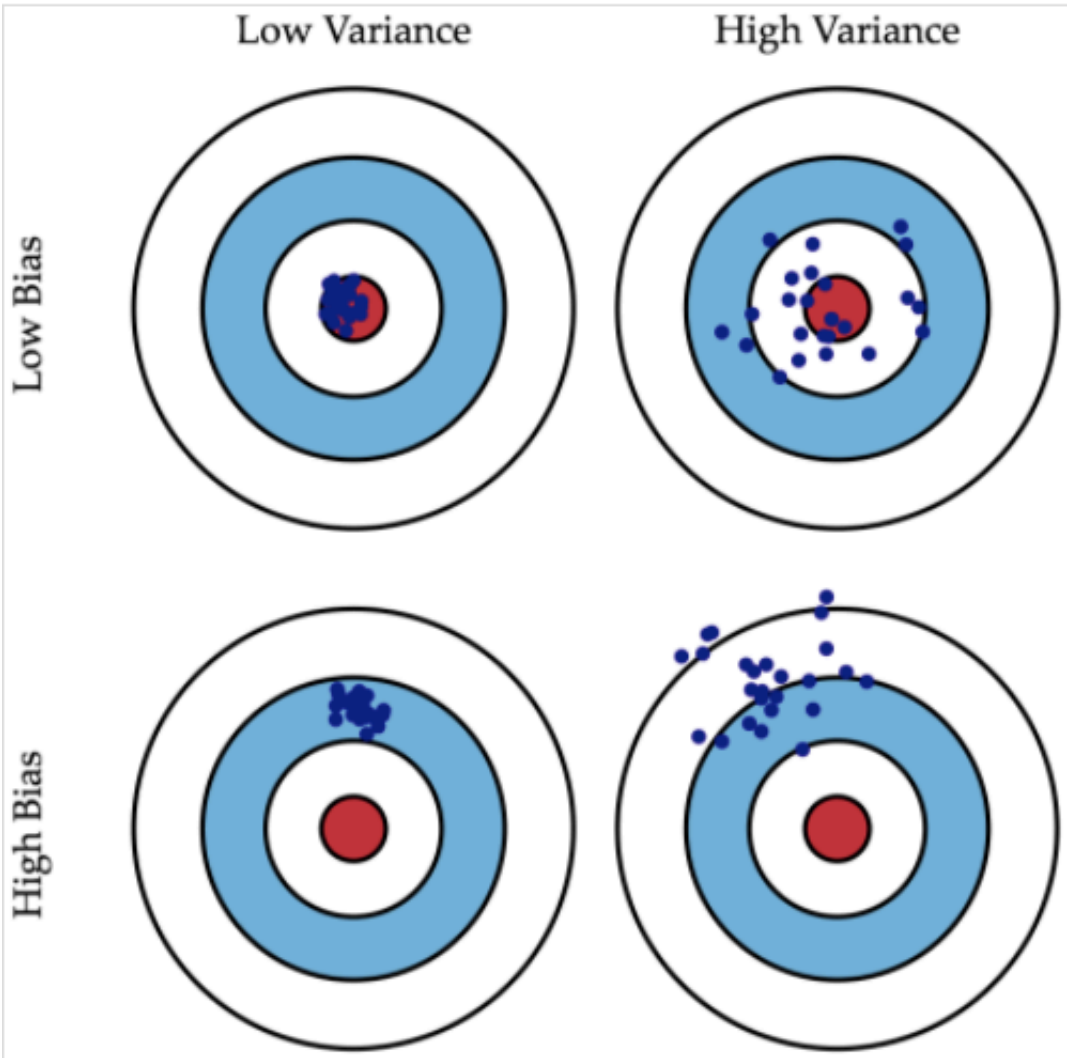
Variance则是“不同的训练数据集训练出的模型”的输出值之间的差异。

在一个实际系统中，Bias与Variance往往是不能兼得的。如果要降低模型的Bias，就一定程度上会提高模型的Variance，反之亦然。造成这种现象的根本原因是，我们总是希望试图用有限训练样本去估计无限的真实数据。当我们更加相信这些数据的真实性，而忽视对模型的先验知识，就会尽量保证模型在训练样本上的准确度，这样可以减少模型的Bias。但是，这样学习到的模型，

很可能会失去一定的泛化能力，从而造成过拟合，降低模型在真实数据上的表现，增加模型的不确定性。相反，如果更加相信我们对于模型的先验知识，在学习模型的过程中对模型增加更多的限制，就可以降低模型的variance，提高模型的稳定性，但也会使模型的Bias增大。Bias与Variance两者之间的trade-off是机器学习的基本主题之一，机会可以在各种机器模型中发现它的影子。

1.2 图示解释

下图将机器学习任务描述为一个打靶的活动：根据相同算法、不同训练数据集训练出的模型，对同一个样本进行预测；每个模型作出的预测相当于是一次打靶。



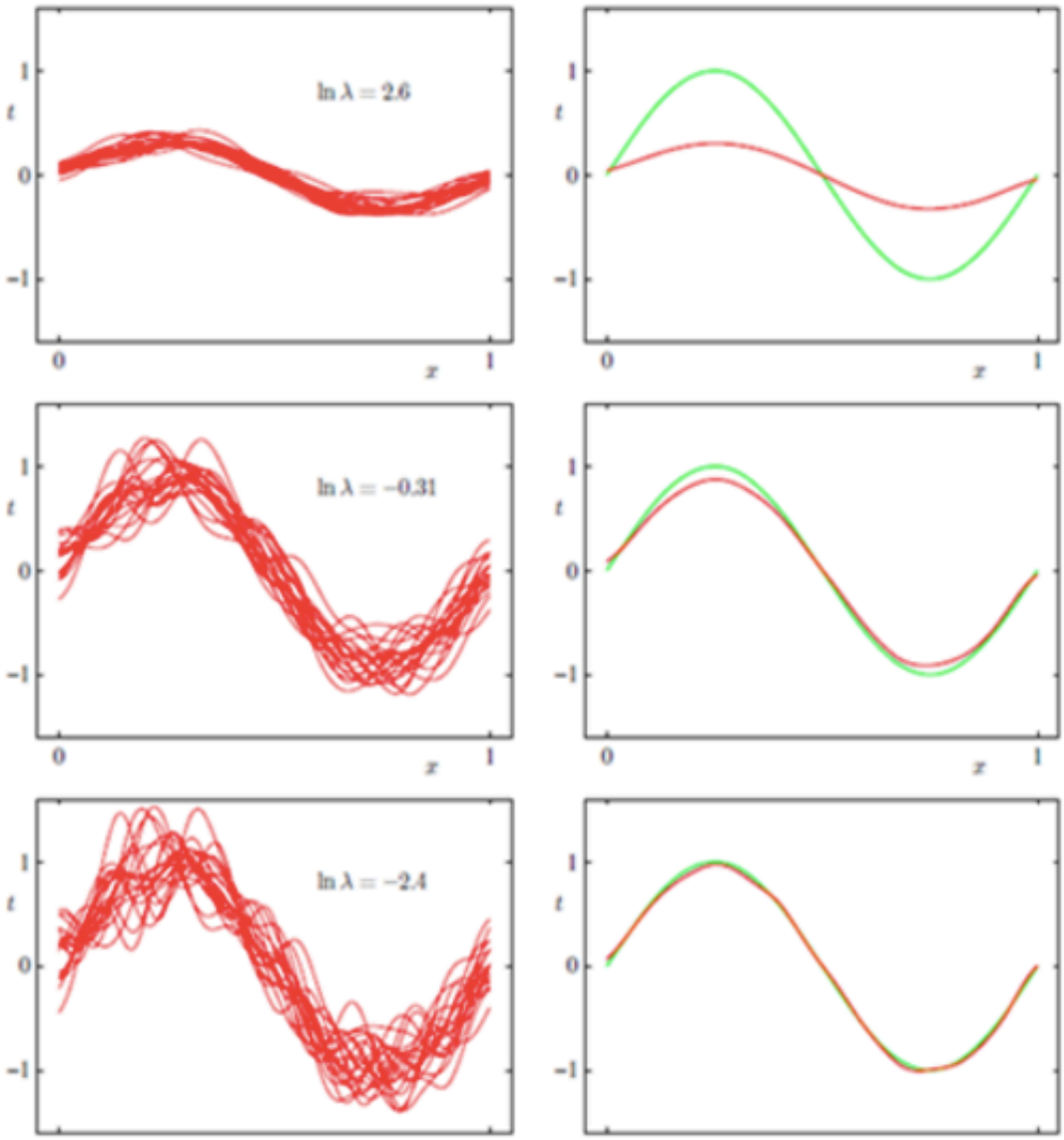
左上角的示例是理想状况：偏差和方差都非常小。如果有无穷的训练数据，以及完美的模型算法，我们是有办法达成这样的情况的。然而，现实中的工程问题，通常数据量是有限的，而模型也是不完美的。因此，这只是一个理想状况。

右上角的示例表示偏差小而方差大。靶纸上的落点都集中分布在红心周围，它们的期望落在红心之内，因此偏差较小。另一方面，落点虽然集中在红心周围，但是比较分散，这是方差大的表现。

左下角的示例表示偏差大而方差小。显而易见，靶纸上的落点非常集中，说明方差小。但是落点集中的位置距离红心很远，这是偏差大的表现。

右下角的示例则是最糟糕的情况，偏差和方差都非常大。这是我们最不希望看到的结果。

再看一个来自PRML的例子：



这是一个曲线拟合的问题，对同分布的不同数据集进行了多次的曲线拟合，左边表示方差（variance），右边表示偏差（bias），绿色是真实值函数。$In\lambda$表示的是模型的复杂度，这个值越小，表示模型的复杂程度越高，在第一行，大家的复杂度都很低的时候，方差是很小的，但是偏差很大；但是到了最后一幅图，我们可以得到，每个人的复杂程度都很高的情况下，不同的函数就有着天壤之别了，所以方差就很大，但此时偏差就很小了。

1.3 数学解释

排除人为的失误，人们一般会遇到三种误差来源：随机误差、偏差和方差。

首先需要说明的是随机误差。随机误差是数据本身的噪声带来的，这种误差是不可避免的。一般认为随机误差服从高斯分布，记作$\varepsilon\ N\left(0,\sigma_{\varepsilon}\right)$。因此，若有变量$y$作为预测值，以及$X$作为自变量（协变量），那么我们将数据背后的真实规律f记作

$$y=f(X)+\epsilon$$

偏差和方差则需要在统计上做对应的定义。

- **偏差（Bias）**描述的是通过学习拟合出来的结果的期望，与真实结果之间的差距，记作

$$Bias\left(X\right)=E\left[\hat{f}\left(X\right)\right]-f\left(X\right)$$

- **方差（Variance）**即为统计学中的定义，描述的是通过学习拟合出来的结果自身的不稳定性，记作

$$E\left[\left(\hat{f}\left(X\right)-E\left[\hat{f}\left(X\right)\right]\right)\right]^{2}$$

以均方误差为例，有如下推论：

$$\begin{aligned}Err\left(X\right)&=E\left[\left(y-\hat{f}\left(X\right)\right)^{2}\right]\\&=E\left[\left(f\left(X\right)+\varepsilon-\hat{f}\left(X\right)\right)^{2}\right]\\&=\left(E\left[\hat{f}\left(X\right)\right]-f\left(X\right)\right)^{2}+E\left[\left(\hat{f}\left(X\right)-E\left[\hat{f}\left(X\right)\right]\right)\right]^{2}+\sigma_{\varepsilon}^{2}\\&=Bias^{2}+Variance+Random\ Error\end{aligned}$$

二、如何Tradeoff

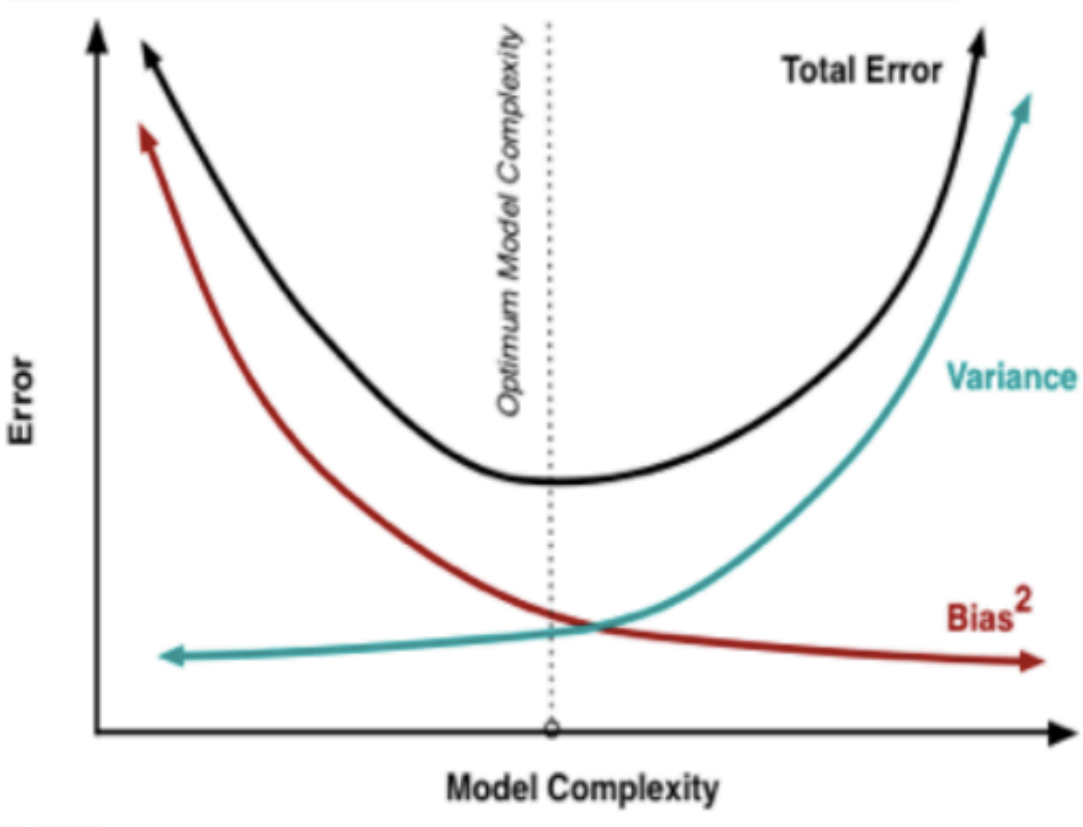
2.1 最佳平衡点

假设我们现在有一组训练数据，需要训练一个模型（基于梯度的学习）。在训练的起始，Bias很大，因为我们的模型还没有来得及开始学习，也就是与“真实模型”差距很大。然而此时variance却很小，因为训练数据集（training data）还没有来得及对模型产生影响，所以此时将模型应用于“不同的”训练数据集也不会有太大的差异。

而随着训练过程的进行，Bias变小了，因为我们的模型变得“聪明”了，懂得了更多关于“真实模型”的信息，输出值与真实值之间更加接近了。但是如果我们训练得太久了，variance就会变得很大，因为我们除了学习到关于真实模型的信息，还学到了许多具体的，只针对我们使用的训练集（真实数据的子集）的信息。而不同的可能的训练数据集（真实数据的子集）之间的某些特征和噪声是不一致的，这就导致了了我们在很多其他的数据集上就无法获得很好地效果，也就是所谓

的Overfitting（过拟合）。

考虑到模型误差是偏差与方差的加和，因此我们可以绘制出这样的图像。



图中的最优位置，实际上是Total Error曲线的拐点。我们知道，连续函数的拐点意味着此处一阶导数的值为0。即

$$\frac{d\left(Total\ Error\right)}{d\left(Complexity\right)}=\frac{d\left(Bias+Variance\right)}{d\left(Complexity\right)}=\frac{d\left(Bias\right)}{d\left(Complexity\right)}+\frac{d\left(Variance\right)}{d\left(Complexity\right)}=0$$

这个公式给出了寻找最优平衡点的数学描述。若模型复杂度小于平衡点，则模型的偏差会偏高，模型倾向于欠拟合；若模型复杂度大于平衡点，则模型的方差会偏高，模型倾向于过拟合。

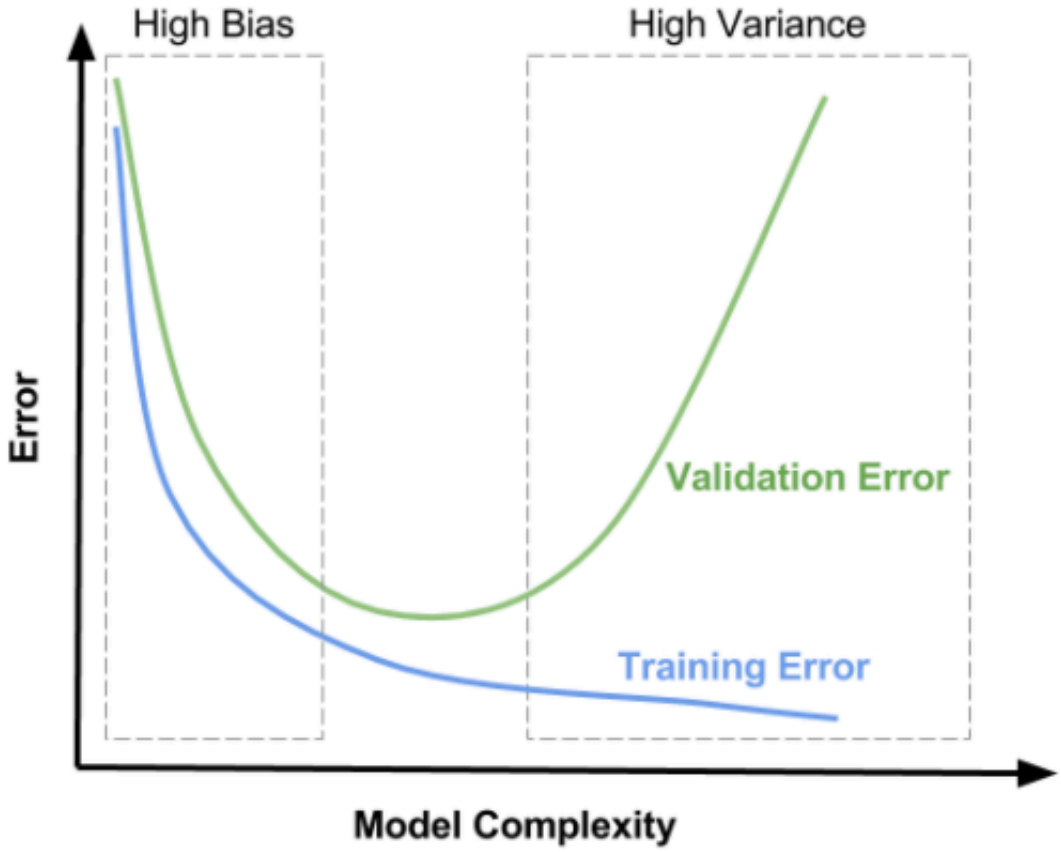
3.2 过拟合与欠拟合的外在表现

尽管有了上述的数学表述，但是在现实环境中，有时候我们很难计算模型的偏差与方差。因此，我们需要通过外在表现，判断模型的拟合状态：是欠拟合还是过拟合。

同样地，在有限的训练数据集中，不断增加模型的复杂度，意味着模型会尽可能多地降低在训练集上的误差。因此在训练集上，不断地增加模型的复杂度，训练集上的误差会一直下降。

我们把数据分为三个部分：训练数据集、验证数据集、测试数据集。

因此，我们可以绘制出这样的图像。



在上图左边区域，训练集与验证集的误差都很高，这块区域的偏差比较高。在右边区域，在验证集上误差很高，但是在训练集上偏差很低，这块区域的方差比较高。我们希望在中间的区域得到一个最优平衡点。

所以，偏差较高（欠拟合）有以下两个特征：

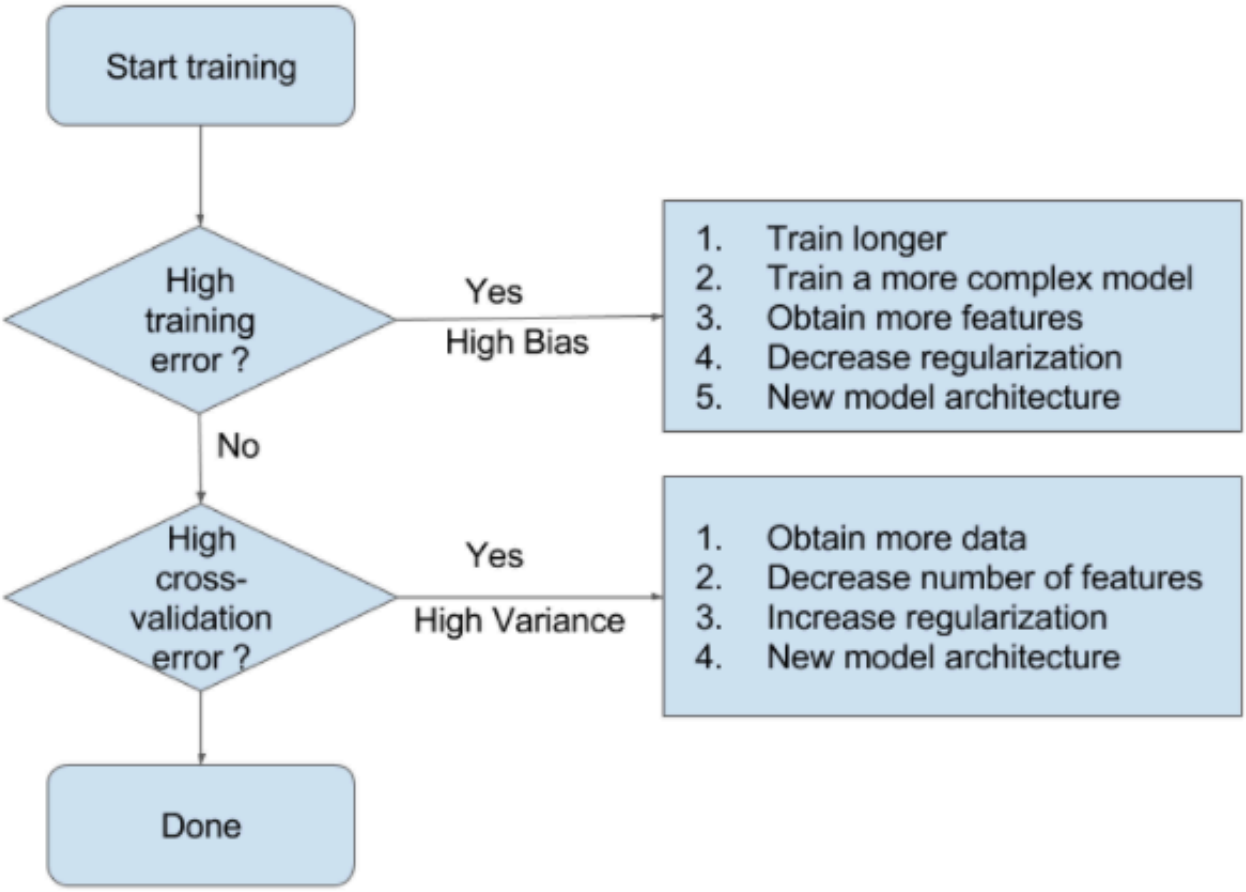
- 1）训练集误差很高
- 2）验证集误差和训练集误差差不多大

方差较高（过拟合）

- 1）训练集误差较低
- 2）非常高的验证集误差

3.3 如何处理欠拟合与过拟合

有了以上的分析，我们就能比较容易地判断模型所处的拟合状态。接下来，我们可以参考Ng提供的处理模型欠拟合与过拟合的一般方法了。



当模型处于欠拟合状态时，根本的办法是增加模型的复杂度。我们一般有以下一些办法：

- 1）增加模型迭代次数；
- 2）训练一个复杂度更高的模型：比如在神经网络中增加神经网络层数、在SVM中用非线性SVM（核技术）代替线性SVM
- 3）获取更多的特征以供训练使用：特征少，对模型信息的刻画就不足够了
- 4）降低正则化权重：正则化正是为了限制模型的灵活度（复杂度）而设定的，降低其权值可以在模型训练中增加模型复杂度。

当模型处于过拟合状态时，根本的办法是降低模型的复杂度。我们一般有以下一些办法：

- 1）获取更多的数据：训练数据集和验证数据集是随机选取的，它们有不同的特征，以致在验证数据集上误差很高。更多的数据可以减小这种随机性的影响。
- 2）减少特征数量
- 3）增加正则化权重：方差很高时，模型对训练集的拟合很好。实际上，模型很有可能拟合了训练数据集的噪声，拿到验证集上拟合效果就不好了。我们可以增加正则化权重，减小模型的复杂度。