十二、计算学习理论

主讲教师：俞扬

slides thanks to 王魏

纲要

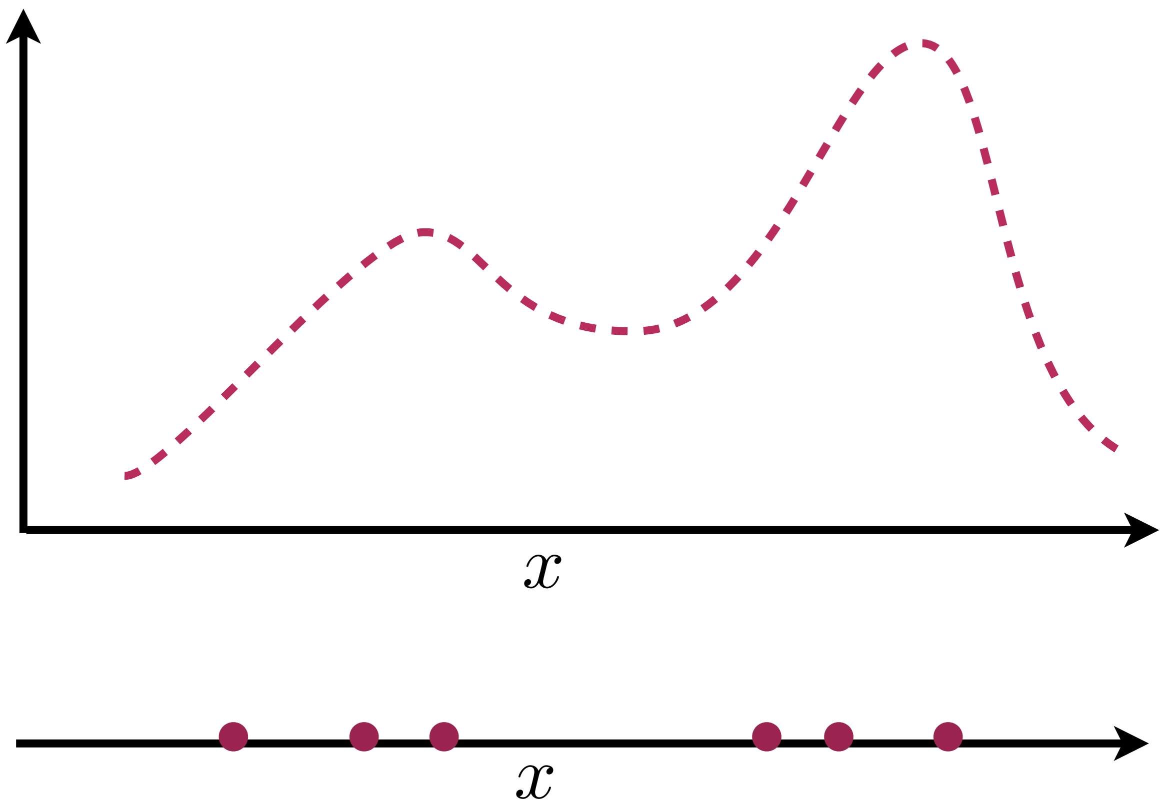
- 概述
  - 关注的问题
  - 一些概念及记号
- 概率近似正确（Probably Approximately Correct)
  - PAC学习
  - 什么是“可学习的”
  - 假设空间复杂性
    - 有限假设空间
    - 无限假设空间：VC维
    - 无限假设空间：Rademacher复杂度
- 稳定性

关注的问题

- 怎样刻画“**学习**”这个过程?
- 什么样的问题是“**可学习的**”?
- 什么样的问题是“**易学习的**”?
- 对于给定的学习算法，能否在理论上预测其性能?
- 理论结果如何指导现实问题的算法设计?

困难的来源

分布（无穷样本）vs 采样（有限样本）



基本工具

iid随机变量 X

Markov inequality $\mathbb{P}(X \geq a) \leq \frac{\mathbb{E}(X)}{a}$

also $\mathbb{P}(X \geq \tilde{a} \cdot \mathbb{E}(X)) \leq \frac{1}{\tilde{a}}$

Hoeffding's inequality $S_n = X_1 + \cdots + X_n$

$$\mathbb{P}\left(S_n - \mathrm{E}\left[S_n\right] \geq t\right) \leq \exp\left(-\frac{2t^2}{\sum_{i=1}^n (b_i - a_i)^2}\right)$$

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}\left(S_n - \mathrm{E}\left[S_n\right] \geq t\right) &= \mathbb{P}\left(e^{s(S_n - \mathrm{E}[S_n])} \geq e^{st}\right) \\
&\leq e^{-st} \mathrm{E}\left[e^{s(S_n - \mathrm{E}[S_n])}\right] \\
&= e^{-st} \prod_{i=1}^n \mathrm{E}\left[e^{s(X_i - \mathrm{E}[X_i])}\right] \\
&\leq e^{-st} \prod_{i=1}^n e^{\frac{s^2 (b_i - a_i)^2}{8}} \\
&= \exp\left(-st + \frac{1}{8} s^2 \sum_{i=1}^n (b_i - a_i)^2\right)
\end{aligned}$$

一些概念及记号

- 样例集：独立同分布样本，仅考虑二分类问题

$$D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\cdots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\},\boldsymbol{x}_i\in\mathcal{X},y_i\in\mathcal{Y}=\{-1,+1\}.$$

- h 为从$\mathcal{X}$到$\mathcal{Y}$的一个映射
  - 泛化误差：分类器的期望误差

$$E(h;\mathcal{D})=P_{x\sim\mathcal{D}}(h(\boldsymbol{x})\neq y)$$

  - 经验误差：分类器在给定样例集上的平均误差

$$\hat{E}(h;D)=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\mathbb{I}(h(\boldsymbol{x}_i)\neq y_i)$$

由于D是$\mathcal{D}$的独立同分布采样，因此h 的经验误差的期望等于其泛化误差。

在上下文明确时，将$E(h;\mathcal{D})$和$\hat{E}(h;D)$ 分别简记为$E(h)$和$\hat{E}(h)$.

一些概念及记号

- 误差参数 ϵ

  ϵ为$E(h)$的上限，即 $E(h) \leq \epsilon$.

  $\Rightarrow$表示预先设定的学得模型所应满足的误差要求

- 经验误差与泛化误差之间逼近程度
  - 一致与不一致

    若 h在数据集 D 上的经验误差为0，则称 h与D 一致，否则不一致。

  - 不合(disagreement)

    对于任意两个映射 $h_1, h_2 \in \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ 通过"不合"度量它们的差别

$$d(h_1, h_2) = P_{x\sim\mathcal{D}}(h_1(\boldsymbol{x}) \neq h_2(\boldsymbol{x}))$$

PAC学习

概念(concept)

概念是从样本空间 $\mathcal{X}$ 到标记空间 $\mathcal{Y}$ 的映射, 它决定示例$\boldsymbol{x}$的真实标记y.

- 目标概念

如果对任何样例 $(\boldsymbol{x}, y)$ 均有 $c(\boldsymbol{x}) = y$ 成立, 则称 c为目标概念.

- 概念类(concept class)

所有我们希望学得的目标概念所构成的集合称为"概念类", 用符号$\mathcal{C}$表示.

PAC学习

假设空间(hypothesis space)

给定学习算法 $\mathcal{L}$, 它所考虑的所有可能概念的集合, 用符号$\mathcal{H}$表示.

- 由于学习算法事先并不知道概念类的真实存在, 因此$\mathcal{H}$ 和$\mathcal{C}$通常是不同的，学习算法会把自认为可能的目标概念集中起来构成$\mathcal{H}$.
- 对于$h \in \mathcal{H}$,由于并不能确定它是否真的是目标概念, 因此称为“假设”.

显然, h也是从样本空间$\mathcal{X}$到标记空间$\mathcal{Y}$ 的映射.

PAC学习

- 可分的与不可分的
  - 可分的(separable)
    若目标概念 $c \in \mathcal{H}$ ，则$\mathcal{H}$中存在假设能将所有的示例完全正确分开(按照与真实标记一致的方式)，则称该问题对学习算法$\mathcal{L}$是"可分的"(separable)，也称"一致的"（consistent).
  - 不可分的(separable)
    若目标概念 $c \notin \mathcal{H}$,则$\mathcal{H}$中不存在任何假设能将所有的示例完全正确分开，则称该问题对学习算法$\mathcal{L}$是"不可分的"(non-separable)，也称"不一致的"（non-consistent).

PAC学习

- 对于给定训练集D, 我们希望基于学习算法$\mathcal{L}$学得的模型所对应的假设h尽可能接近目标概念c.

为什么不是希望精确地学到目标概念c呢?

机器学习过程受到很多因素的制约

- 获得的训练集 D 往往仅包含有限数量的样例, 因此通常会存在一些在 D 上"等效"的假设, 学习算法对它们无法区别;
- 从分布 $\mathcal{D}$ 采样得到 D 的过程有一定的偶然性, 即便对同样大小的不同训练集, 学得结果也可能有所不同.

PAC学习

- 概率近似正确(Probably Approximately Correct, 简称PAC)

我们希望以比较大的把握学得比较好的模型，即**以较大概率学得误差满足预设上限**的模型.

令 δ 表示置信度，则形式化定义：

定义 **PAC辨识(PAC Identify)**

对 $0 < \epsilon, \delta < 1$,所有 $c \in \mathcal{C}$ 和分布 $\mathcal{D}$,若存在学习算法 $\mathcal{L}$, 其输出假设 $h \in \mathcal{H}$ 满足

$$P(E(h) \leq \epsilon) \geq 1 - \delta,$$

则称学习算法 $\mathcal{L}$ 能从假设空间 $\mathcal{H}$ 中PAC辨识概念类 $\mathcal{C}$.

这样的学习算法 $\mathcal{L}$ 能以较大概率(至少 $1-\delta$)学得目标概念 c 的近似(误差最多为 ϵ).

什么是“可学习的”

定义 **PAC可学习(PAC Learnable)**

令 m 表示从分布 $\mathcal{D}$ 中独立同分布采样得到的样例数目, $0 < \epsilon, \delta < 1$, 对所有分布 $\mathcal{D}$,若存在学习算法 $\mathcal{L}$ 和多项式时间 $poly(\cdot,\cdot,\cdot,\cdot)$, 使得对于任何 $m \geq poly(1/\epsilon, 1/\delta, size(\boldsymbol{x}), size(c))$, $\mathcal{L}$ 能从假设空间 $\mathcal{H}$ 中PAC辨识概念类$\mathcal{C}$, 则称概念类 $\mathcal{C}$ 对假设空间 $\mathcal{H}$ 而言是PAC可学习的，有时也简称概念类 $\mathcal{C}$ 是PAC可学习的。

对于计算机算法来说，必然要考虑时间复杂度，于是我们定义PAC学习算法.

什么是“可学习的”

定义 **PAC学习算法(PAC Learning Algorithm)**

若学习算法 $\mathcal{L}$ 使概念类 $\mathcal{C}$ 为PCA可学习的, 且 $\mathcal{L}$ 的运行时间也是多项式函数 $poly(1/\epsilon, 1/\delta, size(\boldsymbol{x}), size(c))$, 则称概念类$\mathcal{C}$是高效PAC可学习(efficiently PAC learnable)的, 称 $\mathcal{L}$ 为概念类$\mathcal{C}$ 的PAC学习算法。

什么是“可学习的”

假定学习算法$\mathcal{L}$处理每个样本的时间为常数, 则$\mathcal{L}$的时间复杂度等价样本复杂度. 于是, 我们对算法时间复杂度的关心就转化到对样本复杂度的关心.

定义 样本复杂度(Sample Complexity)

满足PAC学习算法$\mathcal{L}$ 所需的 $m \geq poly(1/\epsilon, 1/\delta, size(\boldsymbol{x}), size(c))$ 中最小的m, 称为学习算法$\mathcal{L}$ 的样本复杂度。

什么是“可学习的”

- PAC学习的意义：
  - 给出了一个抽象地刻画机器学习能力的框架，基于这个框架可以对很多重要问题进行理论探讨。
    - 研究某任务在什么样的条件下可学得较好的模型?
    - 某算法在什么样的条件下可进行有效的学习?
    - 需要多少训练样例才能获得较好的模型?
  - 把对复杂算法的**时间复杂度**的分析转为对**样本复杂度**的分析

什么是“可学习的”

- 假设空间$\mathcal{H}$的复杂度

  - 恰PAC可学习(properly PAC learnable)

  假设空间$\mathcal{H}$包含了学习算法$\mathcal{L}$所有可能输出的假设，在PAC学习中假设空间与概念类完全相同，即$\mathcal{H} = \mathcal{C}$

  - 直观地看，这意味着学习算法的能力与学习任务“恰好匹配”，即所有候选假设都来自概念类。
  - 看似合理但不符合实际，因为在现实应用中我们对概念类$\mathcal{C}$通常一无所知，更不要说获得一个假设空间与概念类恰好相同的学习算法。

什么是“可学习的”

假设空间$\mathcal{H}$的复杂度

- 研究的重点：当假设空间与概念类不同的情形，即$\mathcal{H} \neq \mathcal{C}$
- 一般而言，$\mathcal{H}$ 越大，其包含任意目标概念的可能性越大，但从中找到某个具体概念的难度也越大.
- $|\mathcal{H}|$ 有限时，我们称$\mathcal{H}$为“有限假设空间”，否则称为“无限假设空间”.

有限假设空间

- 可分情况

目标概念c属于假设空间$\mathcal{H}$ 即 $c \in \mathcal{H}$

给定包含m个样例的训练集D，如何找出满足误差参数的假设呢?

- 一种简单的学习策略

- 由于c存在于假设空间$\mathcal{H}$中，因此任何在训练集 D上出现标记错误的假设肯定不是目标概念c.
- 保留与D一致的假设，剔除与D不一致的假设.
- 若训练集 D足够大，则可不断借助D中的样例剔除不一致的假设，直到$\mathcal{H}$中仅剩下一个假设为止，这个假设就是目标概念c.

有限假设空间

- 通常情形下，由于训练集规模有限，假设空间$\mathcal{H}$中可能存在不止一个与D一致的"等效"假设，对这些假等效假设，无法根据D来对它们的有优劣做进一步区分.

到底需要多少样例才能学得目标概念c的有效近似呢?

- 训练集 D的规模使得学习算法$\mathcal{L}$以概率$1-\delta$找到目标假设的ϵ近似，则:

$$m \geq \frac{1}{\epsilon}(\ln|\mathcal{H}|+\ln\frac{1}{\delta}).$$

- 有限假设空间$\mathcal{H}$都是PAC可学习的，所需的样例数目如上式所示，输出假设h的泛化误差随样例数目的增多而收敛到0，收敛速率为$O(\frac{1}{m})$.

证明

for one *h*

What is the probability of

h is consistent

$\epsilon_g(h) \geq \epsilon$

assume *h* is ***bad***: $\epsilon_g(h) \geq \epsilon$

h is consistent with 1 example:

$$P \leq 1 - \epsilon$$

h is consistent with ***m*** example:

$$P \leq (1 - \epsilon)^m$$

证明

h is consistent with ***m*** example:

$$P \leq (1-\epsilon)^m$$

There are ***k*** consistent hypotheses

Probability of choosing a bad one:

h_1 is chosen and h_1 is bad $P \leq (1-\epsilon)^m$

h_2 is chosen and h_2 is bad $P \leq (1-\epsilon)^m$

...

h_k is chosen and h_k is bad $P \leq (1-\epsilon)^m$

overall:

$\exists h$: *h* can be chosen (consistent) but is bad

证明

h_1 is chosen and h_1 is bad $P \leq (1-\epsilon)^m$
h_2 is chosen and h_2 is bad $P \leq (1-\epsilon)^m$
...
h_k is chosen and h_k is bad $P \leq (1-\epsilon)^m$

overall:

$\exists h$: h can be chosen (consistent) but is bad

Union bound: $P(A \cup B) \leq P(A) + P(B)$

$$P(\exists h \text{ is consistent but bad}) \leq k \cdot (1-\epsilon)^m \leq |\mathcal{H}| \cdot (1-\epsilon)^m$$

证明

$$P(\exists h \text{ is consistent but bad}) \leq k \cdot (1-\epsilon)^m \leq |\mathcal{H}| \cdot (1-\epsilon)^m$$

$$\Downarrow$$

$$P(\epsilon_g \geq \epsilon) \leq \underbrace{|\mathcal{H}| \cdot (1-\epsilon)^m}_{\delta} \qquad (1-\epsilon)^m < e^{-m\epsilon}$$

$$\text{with probability at least } 1-\delta$$

$$\epsilon_g < \frac{1}{m} \cdot \left(\ln|\mathcal{H}| + \ln\frac{1}{\delta}\right)$$

经验风险最小化原则

经验风险最小化(Empirical Risk Minimization, 简称ERM)

令 h 表示学习算法 $\mathcal{L}$ 输出的假设, 若 h 满足

$$\hat{E}(h) = \min_{h' \in \mathcal{H}} \hat{E}(h'),$$

则称 $\mathcal{L}$ 为满足经验风险最小化原则的算法.

有限假设空间

不可分情况

对于较困难的学习问题，目标概念c不属于假设空间$\mathcal{H}$，即假定对于任何$h \in \mathcal{H}, \hat{E}(h) \neq 0$，$\mathcal{H}$中的任何一个假设都会在训练集上出现或多或少的错误.

定理12.1

若$\mathcal{H}$为有限假设空间$0 < \delta < 1$,则对任意$h \in \mathcal{H}$，有

$$P\left(|E(h) - \hat{E}(h)| \leq \sqrt{\frac{\ln|\mathcal{H}| + \ln(2/\delta)}{2m}}\right) \geq 1 - \delta.$$

证明

X be an i.i.d. random variable

$X_1, X_2, \ldots, X_m$ be m samples

$X_i \in [a, b]$

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} X_i - \mathbb{E}[X] \leftarrow \text{ difference between sum and expectation}$$

$$P(\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} X_i - \mathbb{E}[X] \geq \epsilon) \leq \exp\left(-\frac{2\epsilon^2 m}{(b-a)^2}\right)$$

证明

$$\text{for one } h$$

$$X_i = I(h(x_i) \neq f(x_i)) \in [0,1]$$

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} X_i \to \epsilon_t(h) \qquad\qquad \mathbb{E}[X_i] \to \epsilon_g(h)$$

$$P(\epsilon_t(h) - \epsilon_g(h) \geq \epsilon) \leq \exp\left(-2\epsilon^2 m\right)$$

$$P(\epsilon_t - \epsilon_g \geq \epsilon)$$

$$\leq P(\exists h \in |\mathcal{H}| : \epsilon_t(h) - \epsilon_g(h) \geq \epsilon) \leq \underline{|\mathcal{H}| \exp\left(-2\epsilon^2 m\right)}_{\delta}$$

$$\text{with probability at least } 1-\delta$$

$$\epsilon_g < \epsilon_t + \sqrt{\frac{1}{2m} \cdot (\ln|\mathcal{H}| + \ln\frac{1}{\delta})}$$

有限假设空间

定义 **不可知PAC可学习(agnostic PAC Learnable)**

令 m表示从分布$\mathcal{D}$中独立同分布采样得到的样例数目, $0 < \epsilon, \delta < 1$, 对所有分布$\mathcal{D}$,若存在学习算法$\mathcal{L}$和多项式时间 $poly(\cdot, \cdot, \cdot, \cdot)$, 使得对于任何 $m \geq poly(1/\epsilon, 1/\delta, size(\boldsymbol{x}), size(c))$, $\mathcal{L}$能从假设空间$\mathcal{H}$中输出满足下式的假设 h : $P(E(h) - \min_{h' \in \mathcal{H}} E(h') \leq \epsilon) \geq 1 - \delta$, 则称假设空间 $\mathcal{H}$ 是不可知PAC可学习的.

- 若学习算法 $\mathcal{L}$ 的运行时间也是多项式函数 $poly(1/\epsilon, 1/\delta, size(\boldsymbol{x}), size(c))$,则
    - 称假设空间$\mathcal{H}$是高效不可知PAC可学习的;
    - 称学习算法$\mathcal{L}$为假设空间$\mathcal{H}$的不可知PAC学习算法;
    - 称满足上述要求最小的m为学习算法$\mathcal{L}$的样本复杂度.

VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)

- 现实学习任务所面临的通常是无限假设空间
  - 实数域中的所有区间
  - $\mathbb{R}^d$ 空间中的所有线性超平面

- 欲对此种情形的可学习性进行研究，需度量假设空间的复杂性

  常见办法：

  考虑假设空间的**VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)**

VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)

记号引入

给定假设空间$\mathcal{H}$ 和示例集 $D = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_m\}$, $\mathcal{H}$ 中每个假设 h都能对D中示例赋予标记, 标记结果可表示为

$$h|_D = \{(h(\boldsymbol{x}_1), h(\boldsymbol{x}_2), \cdots, h(\boldsymbol{x}_m))\}.$$

- 随着m的增大，$\mathcal{H}$ 中所有假设对 D中的示例所能赋予标记的可能结果数也会增大.

例如，对于二分类问题:

若 D 中只有两个示例，则赋予标记的可能结果只有4种;

若 D 中有3个示例，则可能结果有8种。

VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)

概念引入

- 增长函数(growth function)
- 对分(dichotomy)
- 打散(shattering)

VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)

定义 增长函数(growth function)

对所有 $m \in \mathbb{N}$, 假设空间 $\mathcal{H}$ 的增长函数 $\prod_{\mathcal{H}}(\cdot)$ 为:

$$\prod_{\mathcal{H}}(m) = \max_{\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdot,\boldsymbol{x}_m\}\subseteq\mathcal{X}} \left|\{(h(\boldsymbol{x}_1),h(\boldsymbol{x}_2),\cdots,h(\boldsymbol{x}_m))\,|h\in\mathcal{H}\}\right|.$$

- 增长函数表示假设空间对 m 个示例所能赋予标记的最大可能结果数.
- $\mathcal{H}$ 对示例所能赋予标记的可能结果数越大, $\mathcal{H}$ 的表示能力越强, 对学习任务的适应能力也越强.
- 增长函数表述了假设空间 $\mathcal{H}$ 的表示能力, 由此反映出假设空间的复杂度.

VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)

利用增长函数来估计经验误差与泛化误差之间的关系：

定理12.2

对假设空间 $\mathcal{H}, m \in \mathbb{N}, 0 < \epsilon < 1$ 和任意 $h \in \mathcal{H}$ 有

$$P(|E(h) - \hat{E}(h)| > \epsilon) \leq 4 \prod_{\mathcal{H}} (2m) \exp(-\frac{m\epsilon^2}{8}).$$

VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)

- 假设空间$\mathcal{H}$中不同的假设对于D中示例赋予标记的结果可能相同, 也可能不同;
- 尽管 $\mathcal{H}$ 可能包含无穷多个假设, 但是其对 D 中示例赋予标记的可能结果是有限的: 对于 m 个示例，最多有 2^m 个可能结果(二分类).

VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)

对分(dichotomy)

对二分类问题来说, $\mathcal{H}$ 中的假设对 D 中示例赋予标记的每种可能结果称为对 D 的一种"对分".

打散(shattering)

若假设空间 $\mathcal{H}$ 能实现示例集 D 上的所有对分，即 $\prod_{\mathcal{H}}(m) = 2^m$ 则称示例集 D 能被假设空间 $\mathcal{H}$ "打散".

VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)

定义 **VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)**

假设空间$\mathcal{H}$的VC维是能被$\mathcal{H}$打散的最大示例集的大小, 即

$$\mathrm{VC}(\mathcal{H}) = \max\{m : \Pi_{\mathcal{H}}(m) = 2^m\}.$$

- 增长函数表示假设空间对m个示例所能赋予标记的最大可能结果数。
- $\mathcal{H}$对示例所能赋予标记的可能结果数越大, $\mathcal{H}$的表示能力越强，对学习任务的适应能力也越强。
- 增长函数表述了假设空间$\mathcal{H}$的表示能力, 由此反映出假设空间的复杂度。

VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)

VC维的计算

■ 例1 实数域中的区间$[a,b]$

令$\mathcal{H}$表示实数域中所有闭区间构成的集合$\{h_{[a,b]} : a, b \in \mathbb{R}, a \leq b\}, \mathcal{X} = \mathbb{R}.$

对 $x \in \mathcal{X}$, 若 $x \in [a,b]$, 则$h_{[a,b]}(x) = +1$, 否则 $h_{[a,b]}(x) = -1.$

令 $x_1 = 0.5, x_2 = 1.5,$ 则假设空间$\mathcal{H}$中存在假设 $\{h_{[0,1]}, h_{[0,2]}, h_{[1,2]}, h_{[2,3]}\}$

将$\{x_1, x_2\}$打散，所以假设空间 $\mathcal{H}$ 的VC维至少为2；

对任意大小为3的示例集$\{x_3, x_4, x_5\}$,不妨设 $x_3 < x_4 < x_5$,则$\mathcal{H}$中不存在任何假设 $h_{[a,b]}$ 能实现对分结果 $\{(x_3, +), (x_4, -), (x_5, +)\}$

于是, $\mathcal{H}$的VC维为2.

VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)

VC维的计算

例2 二维实平面的线性划分

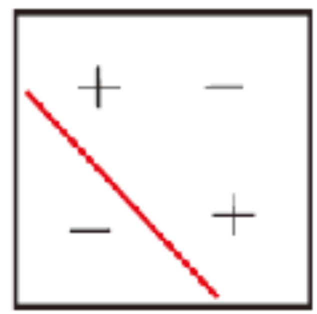
令$\mathcal{H}$表示二维实平面上所有线性划分构成的集合，$\mathcal{X} = \mathbb{R}^2$.

由下图可知，存在大小为3的示例集可被$\mathcal{H}$打散，但不存在大小为4的示例集可被$\mathcal{H}$打散.

于是，二维实平面上所有线性划分构成的假设空间 $\mathcal{H}$ 的VC维为3.

存在这样的集合，其 $2^3 = 8$ 种对分均可被线性划分实现

(a) 示例集大小为 3



对任何集合，其 $2^4 = 16$ 种对分中至少有一种不能被线性划分实现

(b) 示例集大小为 4

VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)

- VC维与增长函数之间的关系：

Sauer引理

若假设空间 $\mathcal{H}$ 的VC维为 d，则对任意$m \in \mathbb{N}$有

$$\Pi_{\mathcal{H}}(m) \leq \sum_{i=0}^{d} \binom{m}{i}.$$

由Sauer引理可以计算出增长函数的上界：

推论：

若假设空间 $\mathcal{H}$ 的VC维为d，则对任意整数$m \geq d$有

$$\Pi_{\mathcal{H}}(m) \leq \left(\frac{e \cdot m}{d}\right)^d.$$

VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)

VC维的泛化误差界:

定理12.3

若假设空间$\mathcal{H}$的VC维为d，则对任意 $m > d, 0 < \delta < 1$ 和 $h \in \mathcal{H}$

有

$$P\left(E(h) - \hat{E}(h) \le \sqrt{\frac{8d\ln\frac{2em}{d} + 8\ln\frac{4}{\delta}}{m}}\right) \ge 1 - \delta.$$

证明:

令 $4\prod_{\mathcal{H}}(2m)\exp(-\frac{m\epsilon^2}{8}) \le 4(\frac{2em}{d})^d\exp(-\frac{m\epsilon^2}{8}) = \delta$

$$\epsilon = \sqrt{\frac{8d\ln\frac{2em}{d} + 8\ln\frac{4}{\delta}}{m}},$$

代入中定理12.2, 于是定理12.3得证.

VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)

VC维的泛化误差界:

定理12.3

若假设空间 $\mathcal{H}$ 的VC维为 d，则对任意 $m > d, 0 < \delta < 1$ 和 $h \in \mathcal{H}$

有

$$P\left(E(h) - \hat{E}(h) \leq \sqrt{\frac{8d\ln\frac{2em}{d} + 8\ln\frac{4}{\delta}}{m}}\right) \geq 1 - \delta.$$

- 上式的泛化误差界只与样例数目 m 有关，收敛速率为 $O(\frac{1}{\sqrt{m}})$.
- 上式的泛化误差界与数据分布 $\mathcal{D}$ 与样例集 D 无关.

因此，基于VC维的泛化误差界

分布无关**(distribution-free) &** 数据独立**(data-independent)**

VC维(Vapnik-Chervonenkis dimension)

经验风险最小化(Empirical Risk Minimization, 简称ERM)

令 h 表示学习算法 $\mathcal{L}$ 输出的假设, 若 h 满足

$$\hat{E}(h) = \min_{h' \in \mathcal{H}} \hat{E}(h'),$$

则称$\mathcal{L}$为满足经验风险最小化原则的算法.

定理**12.4**

任何VC维有限的假设空间 $\mathcal{H}$ 都是(不可知)PAC可学习的.

Rademacher复杂度

- 基于VC维的泛化误差界是**分布无关、数据独立**的，这使得基于 VC维的可学习性分析结果具有一定的"普适性"；但由于没有考虑数据自身，因此得到的泛化误差界通常比较"松".

- 能否在刻画假设空间复杂度时把数据集的分布也考虑进来?

Rademacher复杂度(Rademacher complexity)

另一种刻画假设空间复杂度的途径，与VC维不同的是，它**在一定程度上考虑了数据分布**.

Rademacher复杂度

给定训练集 $D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\cdots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\}$

则假设 h 的经验误差为

$$
\begin{aligned}
\hat{E}(h) &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\mathbb{I}(h(\boldsymbol{x}_i)\neq y_i) \\
&= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\frac{1-y_i h(\boldsymbol{x}_i)}{2} \\
&= \frac{1}{2}-\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}y_i h(\boldsymbol{x}_i)
\end{aligned}
$$

Rademacher复杂度

给定训练集 $D = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \cdots, (\boldsymbol{x}_m, y_m)\}$

则假设h的经验误差为

$$\hat{E}(h) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m} y_i h(\boldsymbol{x}_i)$$

- 其中 $\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_i h(\boldsymbol{x}_i)$ 体现了预测值 $h(\boldsymbol{x}_i)$与样例真实标记 y_i之间的一致性.
- 若对于所有的$i \in \{1, 2, \cdots, m\}$，都有 $h(\boldsymbol{x}_i) = y_i$，则 $\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_i h(\boldsymbol{x}_i)$ 取最大值1.
- 经验误差最小的假设是 $\arg\max_{h \in \mathcal{H}} \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_i h(\boldsymbol{x}_i)$.

Rademacher复杂度

- 经验误差最小的假设是

$$\arg\max_{h\in\mathcal{H}} \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_i h(\boldsymbol{x}_i).$$

- 若假设标签y_i受到随机因素的影响，不再是$\boldsymbol{x}_i$的真实标记．则应该选择$\mathcal{H}$中事先已经考虑了随机噪声影响的假设

$$\sup_{h\in\mathcal{H}} \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \sigma_i h(\boldsymbol{x}_i).$$

  - σ_i 为Rademacher随机变量：

    以0.5的概率取值-1，0.5的概率取值+1．

Rademacher复杂度

考虑$\mathcal{H}$中所有的假设，取期望可得

$$\mathbb{E}_{\sigma}\left[\sup_{h\in\mathcal{H}}\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\sigma_i h(\boldsymbol{x}_i)\right].$$

- 其中 $\boldsymbol{\sigma}=\{\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_m\}$.
- 上式的取值范围是$[0,1]$，体现了假设空间$\mathcal{H}$的表达能力.
  - 当 $|\mathcal{H}|=1$ 时，$\mathcal{H}$ 中仅有一个假设，则期望值为0;
  - 当 $|\mathcal{H}|=2^m$ 且 $\mathcal{H}$ 能打散 D 时，对任意 $\boldsymbol{\sigma}$总有一个假设使得

$$h(\boldsymbol{x}_i)=\sigma_i(i=1,2,\cdots,m)$$

此时可计算出期望值为1.

Rademacher复杂度

定义 **Rademacher复杂度(Rademacher complexity)**

函数空间$\mathcal{F}$关于Z的经验Rademacher复杂度

$$\hat{R}_Z(\mathcal{F}) = \mathbb{E}_\sigma\left[\sup_{f\in\mathcal{F}} \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \sigma_i f(\boldsymbol{z}_i)\right].$$

- 其中 $\mathcal{F}: \mathcal{Z} \to \mathbb{R}$ 为实值函数空间,$Z = \{z_1, z_2, \cdots, z_m\}$, 其中 $z_i \in \mathcal{Z}$.
- 经验Rademacher复杂度衡量了函数空间$\mathcal{F}$与随机噪声在集合Z中的相关性。

Rademacher复杂度

定义 **Rademacher复杂度(Rademacher complexity)**

函数空间$\mathcal{F}$关于$\mathcal{Z}$上分布$\mathcal{D}$的经验Rademacher复杂度

$$R_m(\mathcal{F}) = \mathbb{E}_{Z\subseteq\mathcal{Z}:|Z|=m}\left[\hat{R}_Z(\mathcal{F})\right].$$

- 基于Rademacher复杂度可得关于函数空间 $\mathcal{F}$的泛化误差界.

Rademacher复杂度

定理12.5

对实值函数空间 $\mathcal{F}:\mathcal{Z}\to[0,1]$, 根据分布$\mathcal{D}$从$\mathcal{Z}$ 中独立同分布采样得到示例$Z=\{z_1,z_2,\cdots,z_m\}, z_i\in\mathcal{Z}, 0<\delta<1$, 对任意 $f\in\mathcal{F}$, 以至少 $1-\delta$ 的概率有

$$\mathbb{E}[f(z)]\leq\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}f(z_i)+2R_m(\mathcal{F})+\sqrt{\frac{\ln(1/\delta)}{2m}},$$

$$\mathbb{E}[f(z)]\leq\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}f(z_i)+2\hat{R}_Z(\mathcal{F})+3\sqrt{\frac{\ln(2/\delta)}{2m}}.$$

- 定理12.5中的函数空间$\mathcal{F}$是区间[0,1]上的实值函数，因此只适合回归问题。

Rademacher复杂度

定理12.6

对假设空间 $\mathcal{H}: \mathcal{X} \to \{-1, +1\}$, 根据分布 $\mathcal{D}$ 从 $\mathcal{X}$ 中独立同分布采样得到示例集 $D = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_m\}, \boldsymbol{x}_i \in \mathcal{X}, 0 > \delta < 1,$ 对任意 $h \in \mathcal{H}$, 以至少 $1-\delta$ 的概率有

$$E(h) \leq \hat{E}(h) + R_m(\mathcal{H}) + \sqrt{\frac{\ln(1/\delta)}{2m}},$$

$$E(h) \leq \hat{E}(h) + \hat{R}_D(\mathcal{H}) + 3\sqrt{\frac{\ln(2/\delta)}{2m}}.$$

- 定理12.5只适合回归问题, 定理12.6适合二分类问题。

Rademacher复杂度

定理12.3 VC维的泛化误差界

若假设空间$\mathcal{H}$的VC维为d，则对任意$m > d$，$0 < \delta < 1$和$h \in \mathcal{H}$有

$$P\left(E(h) - \hat{E}(h) \leq \sqrt{\frac{8d\ln\frac{2em}{d} + 8\ln\frac{4}{\delta}}{m}}\right) \geq 1 - \delta.$$

定理12.6 Rademacher复杂度

对假设空间$\mathcal{H} : \mathcal{X} \to \{-1, +1\}$,根据分布$\mathcal{D}$从$\mathcal{X}$中独立同分布采样得到示例集$D = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_m\}, \boldsymbol{x}_i \in \mathcal{X}, 0 > \delta < 1,$

对任意$h \in \mathcal{H}$，以至少$1 - \delta$的概率有

$$E(h) \leq \hat{E}(h) + R_m(\mathcal{H}) + \sqrt{\frac{\ln(1/\delta)}{2m}},$$

$$E(h) \leq \hat{E}(h) + \hat{R}_D(\mathcal{H}) + 3\sqrt{\frac{\ln(2/\delta)}{2m}}.$$

- 定理12.3(基于VC维的泛化误差界)与分布无关、数据独立的;
- 定理12.6(基于Rademacher复杂度的泛化误差界)与分布 $\mathcal{D}$有关, 与数据 D有关.

基于Rademacher复杂度的泛化误差界依赖于具体学习问题的数据分布, 类似于为该问题"量身定制"的, 因此它通常比基于VC维的泛化误差界要更紧一些.

Rademacher复杂度

Rademacher复杂度与增长函数之间的关系:

定理12.7

假设空间 $\mathcal{H}$ 的Rademacher复杂度为 $R_m(\mathcal{H})$ 与增长函数 $\prod_{\mathcal{H}}(m)$ 满足

$$R_m(\mathcal{H}) \leq \sqrt{\frac{2\ln\prod_{\mathcal{H}}(m)}{m}}.$$

- 由定理12.6、定理12.7、推论12.2可得:

$$E(h) \leq \hat{E}(h) + \sqrt{\frac{2d\ln\frac{em}{d}}{m}} + \sqrt{\frac{\ln(1/\delta)}{2m}}.$$

- 我们从Rademacher复杂度和增长函数能推导出基于VC维的泛化误差界.

稳定性(Stability)

- 无论基于VC维和Rademacher复杂度来分析泛化性能，得到的结果均与具体的学习算法无关，这使得人们能够脱离具体的学习算法来考虑学习问题本身的性质。

- 但另一方面，为了获得与算法有关的分析结果，则需另辟蹊径。

- 稳定性(stability)分析是这方面值得关注的一个方向。
  - 考察算法在输入(训练集)发生变化时，输出是否发生较大的变化.

稳定性(Stability)

训练集的两种变化

给定 $D = \{\boldsymbol{z}_1 = (\boldsymbol{x}_1, y_1), \boldsymbol{z}_2 = (\boldsymbol{x}_2, y_2), \cdots, \boldsymbol{z}_m = (\boldsymbol{x}_m, y_m)\}, \boldsymbol{x}_i \in \mathcal{X}$ 是来自分布$\mathcal{D}$ 的独立同分布示例，$y_i = \{-1, +1\}$. 对假设空间$\mathcal{H}: \mathcal{X} \to \{-1, +1\}$ 和学习算法 $\mathfrak{L}$，令 $\mathfrak{L}_D \in \mathcal{H}$ 表示基于训练集 D从假设空间 $\mathcal{H}$中学得的假设.

- $D^{\setminus i}$表示移除 D中第 i个样例得到的集合

$$D^{\setminus i} = \{\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2, \cdots, \boldsymbol{z}_{i-1}, \boldsymbol{z}_{i+1}, \cdots, \boldsymbol{z}_m\},$$

- D^i表示替换 D中第 i个样例得到的集合

$$D^i = \{\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2, \cdots, \boldsymbol{z}_{i-1}, \boldsymbol{z}'_i, \boldsymbol{z}_{i+1}, \cdots, \boldsymbol{z}_m\},$$

其中 $\boldsymbol{z}'_i = (\boldsymbol{x}'_i, y'_i), \boldsymbol{x}'_i$ 服从分布 $\mathcal{D}$ 并独立于D.

稳定性(Stability)

损失函数

$\ell(\mathcal{L}_D(\boldsymbol{x}), y) : \mathcal{Y} \times \mathcal{Y} \longmapsto \mathbb{R}^+$ 刻画假设$\mathcal{L}_D$ 的预测标记$\mathcal{L}_D(\boldsymbol{x})$与真实标记 y 之间的差别，简记为 $\ell(\mathcal{L}_D, \boldsymbol{z})$.

- 泛化损失

$$\ell(\mathcal{L}, D) = \mathbb{E}_{x \in \mathcal{X}, z=(\boldsymbol{x}, y)}[\ell(\mathcal{L}_D, \boldsymbol{z})].$$

- 经验损失

$$\hat{\ell}(\mathcal{L}, D) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \ell(\mathcal{L}_D, \boldsymbol{z}_i).$$

- 留一(leave-one-out)损失：

$$\ell_{loo}(\mathcal{L}, D) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \ell(\mathcal{L}_{D^{\setminus i}}, \boldsymbol{z}_i).$$

稳定性(Stability)

定义 **算法的均匀稳定性(uniform stability)**

对任何 $x \in \mathcal{X}, z = (x, y)$, 若学习算法$\mathfrak{L}$满足

$$|\ell(\mathfrak{L}_D, z) - \ell(\mathfrak{L}_{D^{\setminus i}}, z)| \le \beta, i = 1, 2, \cdots, m,$$

则称 $\mathfrak{L}$ 关于损失函数 ℓ 满足 $\beta-$均匀稳定性.

- 若算法 $\mathfrak{L}$ 关于损失函数 ℓ 满足 $\beta-$均匀稳定性, 则有

$$\begin{aligned} & |\ell(\mathfrak{L}_D, z) - \ell(\mathfrak{L}_{D^i}, z)| \\ \le \; & |\ell(\mathfrak{L}_D, z) - \ell(\mathfrak{L}_{D^{\setminus i}}, z)| + |\ell(\mathfrak{L}_{D^i}, z) - \ell(\mathfrak{L}_{D^{\setminus i}}, z)| \\ \le \; & 2\beta \end{aligned}$$

也就是说, 移除示例的稳定性包含替换示例的稳定性.

稳定性(Stability)

- 若损失函数ℓ有界

  对所有D 和 $\boldsymbol{z}=(\boldsymbol{x},y)$ 有 $0\leq l(\mathcal{L}_D,\boldsymbol{z})\leq M$, 则有

定理12.8

给定从分布 $\mathcal{D}$ 上独立同分布采样得到的大小为m的示例集 D,若学习算法$\mathcal{L}$满足关于损失函数 ℓ 的 β一均匀稳定性, 且损失函数 ℓ 的上界为M, 同时 $0<\delta<1$, 则对任意$m\geq 1$,以至少 $1-\delta$ 的概率有

$$\ell(\mathcal{L},\mathcal{D})\leq\hat{\ell}(\mathcal{L},D)+2\beta+(4m\beta+M)\sqrt{\frac{\ln(1/\delta)}{2m}},$$

$$\ell(\mathcal{L},\mathcal{D})\leq\ell_{loo}(\mathcal{L},D)+\beta+(4m\beta+M)\sqrt{\frac{\ln(1/\delta)}{2m}}.$$

稳定性(Stability)

- 定理12.8给出了基于稳定性分析推导出的学习算法$\mathcal{L}$学得假设的泛化误差界.
  - 经验损失与泛化损失之间差别的收敛率为 $\beta\sqrt{m}$;

    若 $\beta = O(\frac{1}{m})$ 则可保证收敛率为 $O(\frac{1}{\sqrt{m}})$.
  - 收敛率与基于VC维和Rademacher复杂度得到的收敛率一致.

稳定性(Stability)

- 学习算法的稳定性分析关注的是 $|\hat{\ell}(\mathcal{L}, D) - \ell(\mathcal{L}, \mathcal{D})|$;
- 假设空间复杂度分析所关注的是 $\sup_{h \in \mathcal{H}} |\hat{E}(h) - E(h)|$.

因此, 稳定性分析不必考虑假设空间中所有可能的假设, 只需根据分析算法自身的特性(稳定性)来讨论输出假设 $\mathcal{L}_D$ 的泛化误差界.

稳定性与可学习性之间有什么关系呢?

首先必须假设 $\beta\sqrt{m} \to 0$, 这样才能保证稳定的学习算法具有一定泛化能力, 即经验损失收敛于泛化损失, 否则可学习性无从谈起.

稳定性(Stability)

□经验风险最小化(Empirical Risk Minimization)原则

对损失函数 ℓ , 若学习算法 $\mathcal{L}$ 所输出的假设满足经验损失最小化, 则称算法 $\mathcal{L}$ 满足经验风险最小化原则, 简称算法是ERM的.

定理12.9

若学习算法 $\mathcal{L}$ 是ERM且稳定的, 则假设空间 $\mathcal{H}$ 可学习.

- 学习算法的稳定性能导出假设空间的可学习性.
- 稳定性和假设空间课通过损失函数 ℓ 联系起来.

总结

- 概述
  - 关注的问题
  - 一些概念及记号
- 概率近似正确（Probably Approximately Correct)
  - PAC学习
  - 什么是“可学习的”
  - 假设空间复杂性
    - 有限假设空间
    - 无限假设空间：VC维
    - 无限假设空间：Rademacher复杂度
- 稳定性

前往……