

机器学习

Machine Learning

授课老师：刘雪明

电 话：87543563

办 公 室：南一楼西303

邮 箱：xm_liu@hust.edu.cn

第二章、机器学习理论

目录 CONTENTS

01 机器可学习性分析

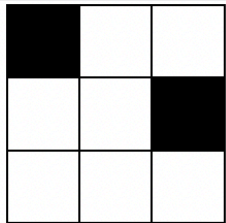
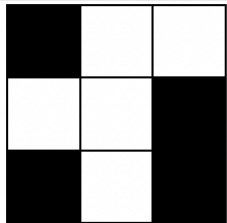
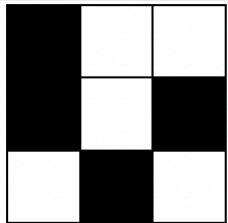
02 Hoeffding不等式与模式二分性

03 VC维理论与模型复杂性

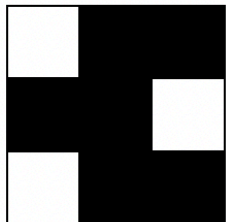
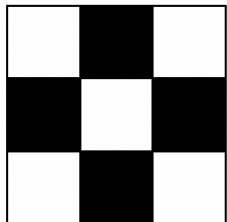
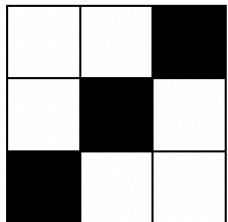
本章学习的目的：**理解机器为什么可以学习**

1、机器可学习性分析

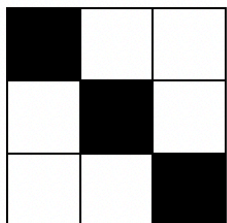
➤ 通过学习前6幅图的规律推测 $g(x)$ 的值



$y_n = -1$



$y_n = +1$



$g(\mathbf{x}) = ?$

✓ $g(x) = 1$

可能的理由1：对称

可能的理由2：左上角格子白色

.....

✓ $g(x) = -1$

可能的理由1：右上角白色且中间列最多1个黑色格子

可能的理由2：左上角格子黑色

.....

1、机器可学习性分析

- 一个简单的二分类问题，给定如下已知条件，可否学到一个函数 g 接近于目标函数 f ？

\mathbf{x}_n	$y_n = f(\mathbf{x}_n)$
0 0 0	○
0 0 1	×
0 1 0	×
0 1 1	○
1 0 0	×

目标函数 f 未知，可能的假设空间 \mathcal{H} 有 2^8 种可能，从中选择前5个结果与给定条件一致的 2^3 个假设

1、机器可学习性分析

\mathcal{D}	\mathbf{x}	y	g	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7	f_8
	0 0 0	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○
	0 0 1	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×
	0 1 0	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×
	0 1 1	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○
	1 0 0	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×
	1 0 1		?	○	○	○	○	×	×	×	×
	1 1 0		?	○	○	×	×	○	○	×	×
	1 1 1		?	○	×	○	×	○	×	○	×

- ✓ 这8个假设均能保证数据集 \mathcal{D} 上 $g \approx f$
- ✓ 在数据集 \mathcal{D} 外没法确定哪个假设更准确 (没有免费午餐定理)

1、机器可学习性分析



➤ 没有免费午餐定理(No Free Lunch Theorem)

任何一个预测函数，如果在一些训练样本上表现好必然在另一些训练样本上表现不好，如果不对数据在特征空间的先验分布有一定假设，那么表现好与表现不好的情况一样多。

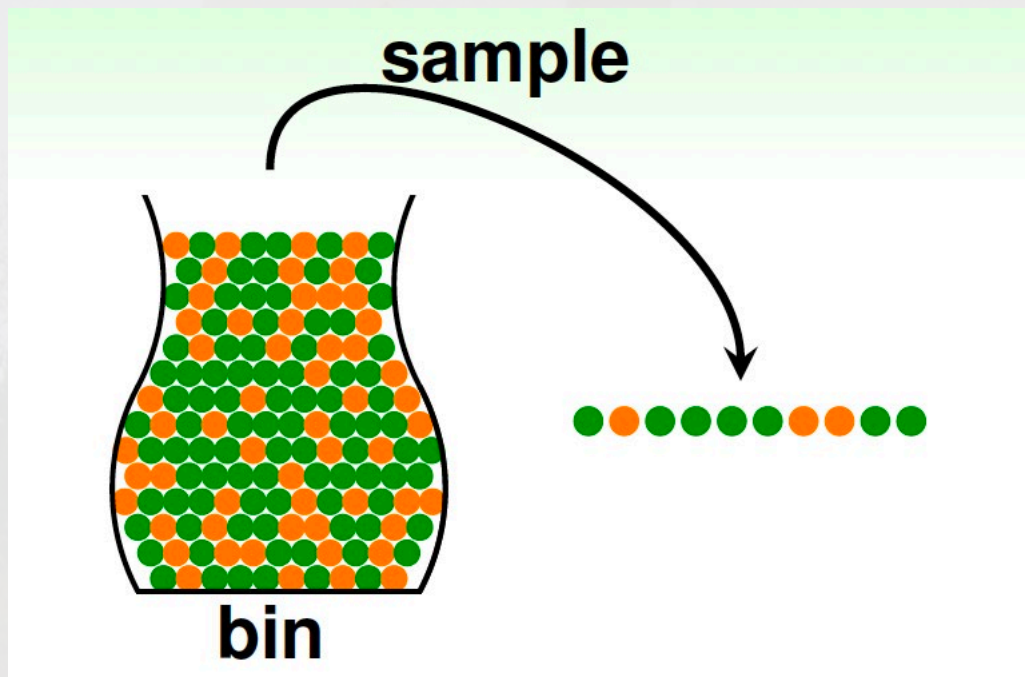


沃尔珀特(Wolpert)

✓ 如何确定在数据集 \mathcal{D} 外 $g \approx f$?

1、机器可学习性分析

➤ 统计学上如何估计未知量：如何估计罐子里橙色球的比例？



- ✓ 假设罐子里橙色球比例为 u
- ✓ 采样样本中橙色球比例为 v

➤ 是否可以根据 v 来推测 u ？

- ✓ 可能罐子里大部分是橙色球，而抽样全是绿球
- ✓ 可能两者近似相等 $u \approx v$

1、机器可学习性分析



- ✓ 未知量：罐子里橙色球比例为 u
- ✓ 已知量：采样样本中橙色球比例为 v



Wassily
Hoeffding

➤ 霍夫丁不等式(Hoeffding's Inequality)

当抽样样本(N)足够大时, u 与 v 可能近似相等 (在 ε 范围内)

$$P(|u - v| > \varepsilon) \leq 2\exp(-2\varepsilon^2 N)$$

这时称 " $u \approx v$ " 是可能近似正确的 (probably approximately correct (**PAC**))

1、机器可学习性分析



➤ 霍夫丁不等式(Hoeffding's Inequality)

当抽样样本(N)足够大时, u 与 v 可能近似相等 (在 ε 范围内)

$$P(|u - v| > \varepsilon) \leq 2\exp(-2\varepsilon^2 N)$$

测验: $u=0.4$, 采样10个样本得到的比例 $v<0.1$, 那 u 和 v 近似相等可能性的上限是多少?

A、 0.67

B、 0.4

C、 0.33

D、 0.05

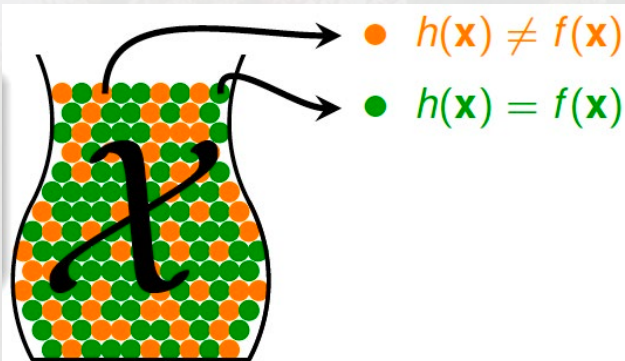


1、机器可学习性分析

➤ 抽样模型及霍夫丁不等式与学习的联系

罐子抽样模型

- 需确定的量：橙色球比例 u
- 球的空间：罐子
- 橙色球
- 绿色球
- 从罐子里抽 N 个样本



学习模型

- 需确定的量：给定假设上 $h(\vec{x}) = f(\vec{x})$ 是否成立？
- 输入空间： $\vec{x} \in \mathcal{X}$
- h 正确： $h(\vec{x}) = f(\vec{x})$
- h 错误： $h(\vec{x}) \neq f(\vec{x})$
- 数据集 $\mathcal{D} = \{(x_n, y_n)\}$ 上确定 h 是否正确

数据集规模足够大时，可通过数据集上 $h(\vec{x}) \neq f(\vec{x})$ 的概率来推测输入空间上 $h(\vec{x}) \neq f(\vec{x})$ 的概率

1、机器可学习性分析

➤ 抽样模型及霍夫丁不等式与学习的联系

罐子抽样模型

- 需确定的量：橙色球比例 u
- 球的空间：罐子
- 橙色球
- 绿色球
- 从罐子里抽 N 个样本

学习模型

- 需确定的量：给定假设上 $h(\vec{x}) = f(\vec{x})$ 是否成立？
- 输入空间： $\vec{x} \in \mathcal{X}$
- h 正确： $h(\vec{x}) = f(\vec{x})$
- h 错误： $h(\vec{x}) \neq f(\vec{x})$
- 数据集 $\mathcal{D} = \{(x_n, y_n)\}$ 上确定 h 是否正确

备注：统计分析要求样本是均匀采样得到的

机器学习要求样本满足**独立同分布** (independent and identically distributed, 简写**i.i.d.**)

1、机器可学习性分析



➤ 抽样模型及霍夫丁不等式与学习的联系

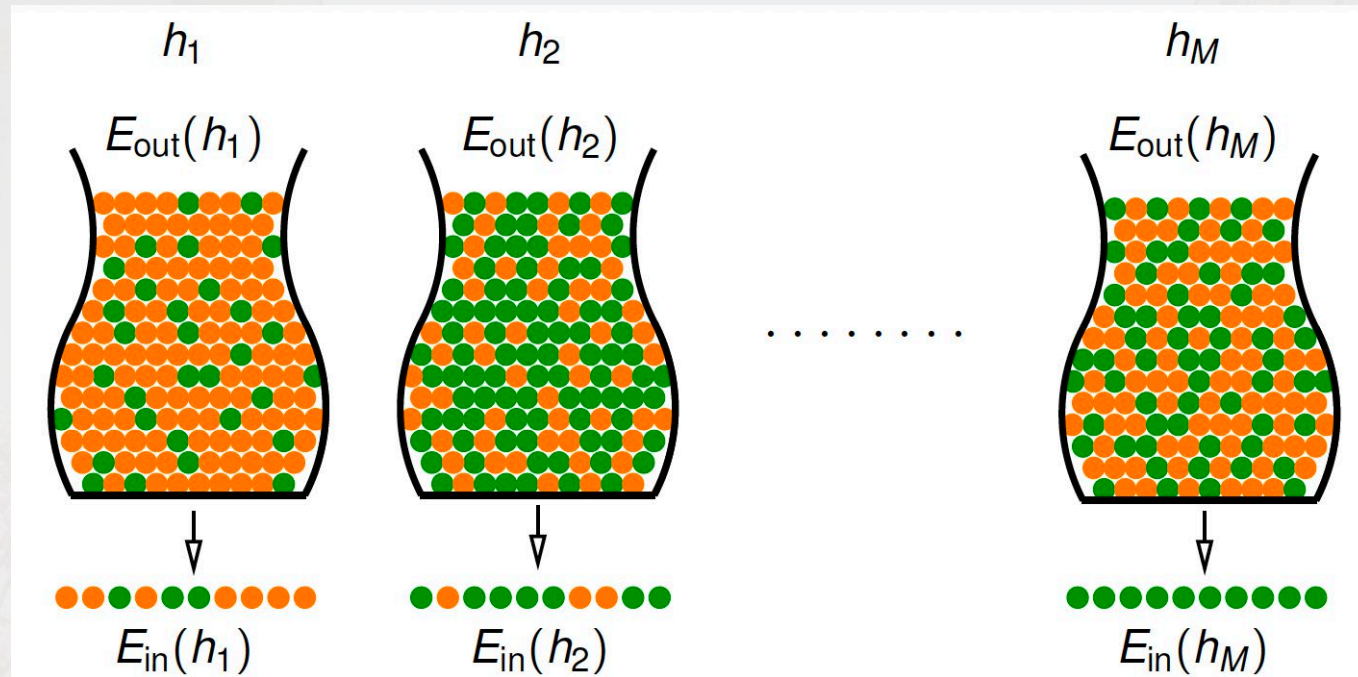
定义数据集上的错误率及 $h(\vec{x}) \neq f(\vec{x})$ 的概率为 $E_{in}(h)$ ，样本空间上的错误率为 $E_{out}(h)$ ，当数据集规模很大时，两者在 ε 误差范围内近似相等：

$$P(|E_{in}(h) - E_{out}(h)| > \varepsilon) \leq 2\exp(-2\varepsilon^2 N)$$

- ✓ 若 $E_{in}(h) \approx E_{out}(h)$ 且 $E_{in}(h)$ 很小，
则样本空间上的错误率 $E_{out}(h)$ 小，即 $h \approx f$
- ✓ 若选择假设 h 作为学习函数 g ，且 $E_{in}(h)$ 小，则“ $g \approx f$ ” PAC
- ✓ 反之，则“ $g \neq f$ ” PAC

1、机器可学习性分析

➤ 存在多个假设的情况



❖ 在假设空间 $\mathcal{H} = \{h_1, h_2, \dots, h_M\}$ 上选择样本错误率 $E_{in}(h)$ 低的假设 h_k 作为学习函数 g ，能说明在所有样本空间上的错误率 $E_{out}(h)$ 也低吗？

1、机器可学习性分析

- ✓ 依据**墨菲定律**，虽然某事件发生几率极低，但如果重复次数达到大规模的时候，则小概率的事件必然发生。即 $E_{in}(h)$ 与 $E_{out}(h)$ 相差甚远的情况（称为**BAD**样本）可能发生

	\mathcal{D}_1	\mathcal{D}_2	...	\mathcal{D}_{1126}	...	\mathcal{D}_{5678}	...	Hoeffding
h	BAD					BAD		$\mathbb{P}_{\mathcal{D}} [\text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h] \leq \dots$

- ✓ 依据**霍夫丁不等式**，**BAD**样本产生的概率低

$$\mathbb{P}_{\mathcal{D}} [\text{**BAD** } \mathcal{D}] = \sum_{\text{all possible } \mathcal{D}} \mathbb{P}(\mathcal{D}) \cdot [\text{**BAD** } \mathcal{D}]$$

1、机器可学习性分析



➤ 存在多个假设时

	\mathcal{D}_1	\mathcal{D}_2	...	\mathcal{D}_{1126}	...	\mathcal{D}_{5678}	Hoeffding
h_1	BAD					BAD	$\mathbb{P}_{\mathcal{D}} [\text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_1] \leq \dots$
h_2		BAD					$\mathbb{P}_{\mathcal{D}} [\text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_2] \leq \dots$
h_3	BAD	BAD				BAD	$\mathbb{P}_{\mathcal{D}} [\text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_3] \leq \dots$
...							
h_M	BAD					BAD	$\mathbb{P}_{\mathcal{D}} [\text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_M] \leq \dots$
all	BAD	BAD				BAD	?

➤ 算法在假设空间
 $\mathcal{H} = \{h_1, h_2, \dots, h_M\}$
中自由选择时选到
BAD样本的概率为

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}_{\mathcal{D}} [\text{BAD } \mathcal{D}] \\ = & \mathbb{P}_{\mathcal{D}} [\text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_1 \text{ or } \text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_2 \text{ or } \dots \text{ or } \text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_M] \\ \leq & \mathbb{P}_{\mathcal{D}} [\text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_1] + \mathbb{P}_{\mathcal{D}} [\text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_2] + \dots + \mathbb{P}_{\mathcal{D}} [\text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_M] \\ & \text{(union bound)} \\ \leq & 2 \exp(-2\epsilon^2 N) + 2 \exp(-2\epsilon^2 N) + \dots + 2 \exp(-2\epsilon^2 N) \\ = & 2M \exp(-2\epsilon^2 N) \end{aligned}$$

1、机器可学习性分析



- 存在多个假设时, $P_D[\text{BAD } \mathcal{D}] \leq 2M \exp(-2\varepsilon^2 N)$
- ✓ 若假设空间规模 $|\mathcal{H}| = M$ 有限, 而样本量 N 足够大时, 任选假设 h_k 作为学习函数 g , 都有 $E_{in}(g) \approx E_{out}(g)$ (**predict**)
- ✓ 若选到的学习函数 $E_{in}(g) \approx 0$ (**train**), 则对应的 $E_{out}(g) \approx 0$
 - ➡ 数据集 \mathcal{D} 外 $g \approx f$
 - ➡ 机器可学习

❖ **问题**: 当 M 无限时, 怎么论证机器可学习?

❖ **参考资料**: **Learning from data**, 2012, Abu-Mostafa et al.

1、机器可学习性分析



➤ 测验：根据霍夫定不等式

$$P(|E_{in}(h) - E_{out}(h)| > \varepsilon) \leq 2M \exp(-2\varepsilon^2 N) = \delta$$

可由给定的容忍误差 ε 和对坏样本的容忍误差 δ 来确定需要收集多大的数据集 N 来满足该要求。给定 $\varepsilon = 0.1$, $\delta = 0.05$, $M = 100$,那么需要多大的数据集。

A、 215

B、 415

C、 615

D、 815



$$N = \frac{1}{2\varepsilon^2} \ln \frac{2M}{\delta}$$

2、Hoeffding不等式与模式二分性



❖ 问题：当 M 无限时，怎么论证机器可学习？

➤ 存在多个假设时，Hoeffding不等式 $P_{\mathcal{D}}[\text{BAD } \mathcal{D}] \leq 2M \exp(-2\epsilon^2 N)$ 中 M 的由来：

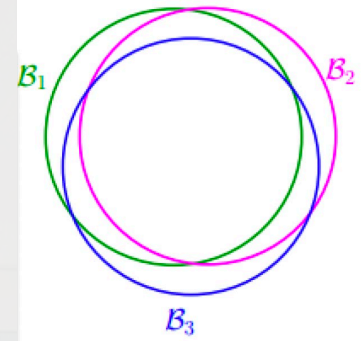
$$\begin{aligned} & \mathbb{P}_{\mathcal{D}}[\text{BAD } \mathcal{D}] \\ &= \mathbb{P}_{\mathcal{D}}[\text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_1 \text{ or } \text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_2 \text{ or } \dots \text{ or } \text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_M] \\ &\leq \mathbb{P}_{\mathcal{D}}[\text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_1] + \mathbb{P}_{\mathcal{D}}[\text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_2] + \dots + \mathbb{P}_{\mathcal{D}}[\text{BAD } \mathcal{D} \text{ for } h_M] \\ &\quad (\text{union bound}) \\ &\leq 2 \exp(-2\epsilon^2 N) + 2 \exp(-2\epsilon^2 N) + \dots + 2 \exp(-2\epsilon^2 N) \\ &= 2M \exp(-2\epsilon^2 N) \end{aligned}$$

这里的union bound计算假定不同假设间没有交集

2、Hoeffding不等式与模式二分性



- 通常不同假设对应的坏事件间存在交集，上述式子中union bound被过高估计了



- ❖ **问题**：如何寻找这些坏事件间重叠的部分？使得霍夫丁不等式右边无限大的 M 可被某个有限值 $m_{\mathcal{H}}$ 所限定，即

$$P(|E_{in}(h) - E_{out}(h)| > \varepsilon) \leq 2m_{\mathcal{H}} \exp(-2\varepsilon^2 N)$$

下面以感知器学习模型**PLA** (Perceptron Learning Algorithm) 为例来说明

2、Hoeffding不等式与模式二分性



- 感知器学习模型**PLA**（二分类模型且线性可分）中可能的假设空间 \mathcal{H} 是无限大的（存在无数可能的分界线 $|\mathcal{H}| = M = \infty$ ），但有效直线的种类 $effective(N) = |\mathcal{H}(x_1, x_2, \dots, x_N)|$ 却是有限的

2、Hoeffding不等式与模式二分性

- ✓ 考虑2维平面上1个样本的二分类模型（ \mathcal{H} 是平面上所有的线）



该模型存在的无限个假设可被归类为上述2种（ $effective(N) = 2$ ）：

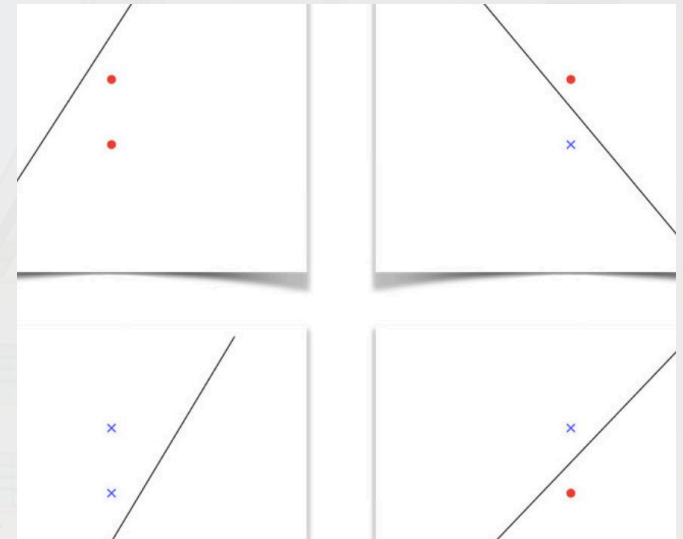
- ✓ 线在样本左边，样本分类为+1（红圈）；
 - ✓ 线在样本右边，样本分类为-1（蓝叉）
- 样本要么被判定为+1，要么被判定为-1，其中任意一种输出叫做一种dichotomy（二分、对分）

2、Hoeffding不等式与模式二分性



- ✓ 下面考虑2个样本的二分类模型

该模型无限多的假设可被归类为右边4种，
输出分别为 $(+1, +1)$, $(-1, +1)$, $(-1, -1)$, $(+1, -1)$ ，称有效直线数量为 $effective(N) = 4$



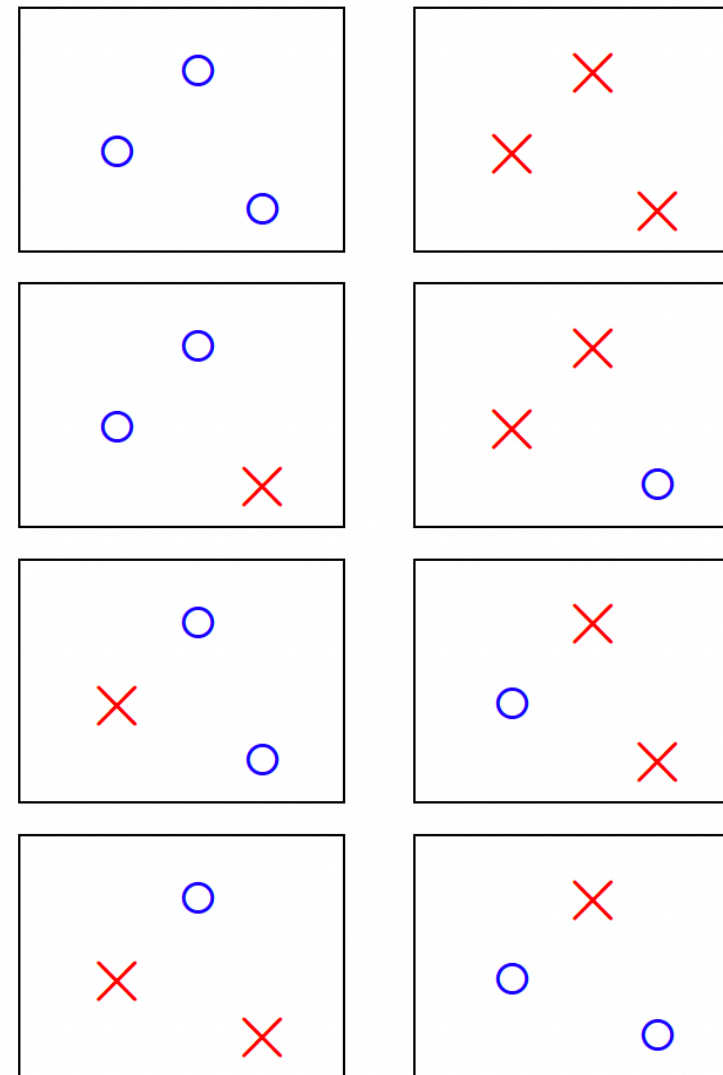
- $N = 2$ 的感知器分类模型的假设空间有4种dichotomies
- 若两个假设 h_1, h_2 对训练数据的输出 \mathcal{D} 是相同的，即 $(h_1(x_1), h_1(x_2), \dots, h_1(x_N)) = (h_2(x_1), h_2(x_2), \dots, h_2(x_N))$ ，则称 h_1, h_2 对这 N 个样本是“等效”的，其输出称为 \mathcal{D} 的一种dichotomy
- N 个样本的感知器分类模型最多存在 2^N 种dichotomies

2、Hoeffding不等式与模式二分性

✓ 下面考虑3个样本的二分类模型

该模型无限多的假设可被归类为右边8种，
即有效直线数量为 $effective(N) = 8$

➤ 3个样本的感知器分类模型存在
 2^3 种 dichotomies

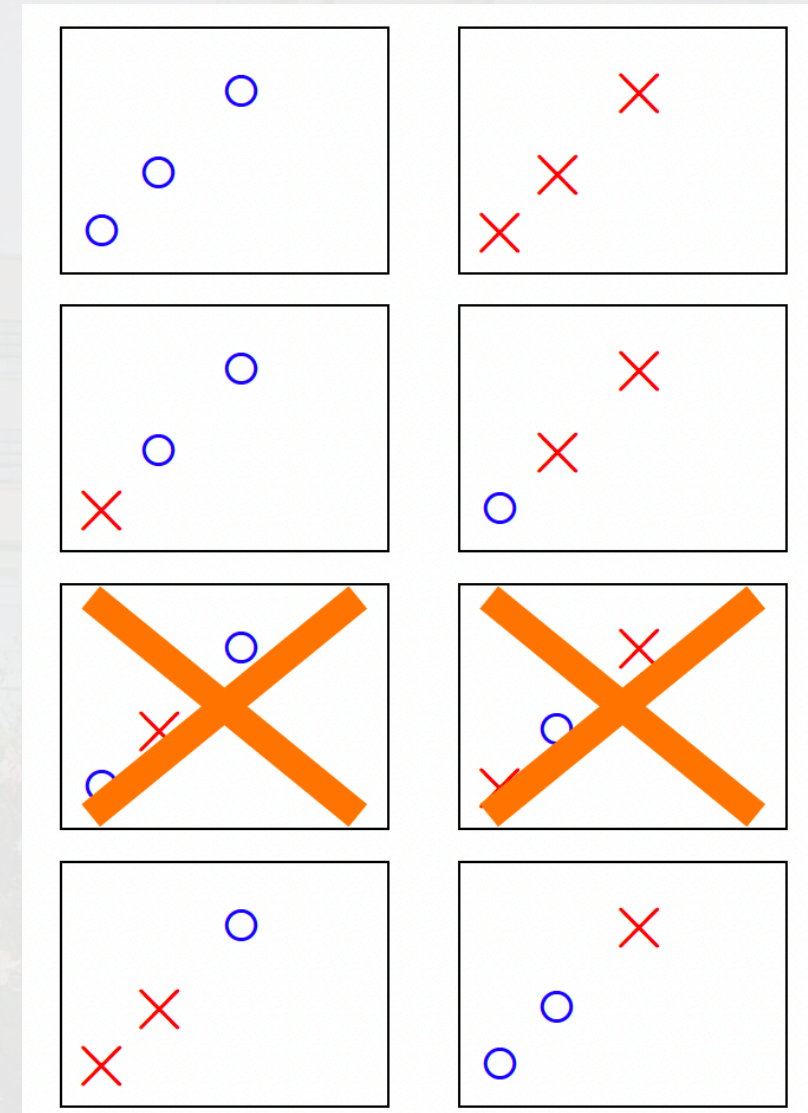


2、Hoeffding不等式与模式二分性

- ✓ 下面考虑直线排列的3个样本的二分类模型

该模型无限多的假设可被归类为右边6种，
即有效直线数量为 $effective(N) = 6$

- 直线排列的3个样本的感知器分类模型存在 $6 < 2^3$ 种 **dichotomies**

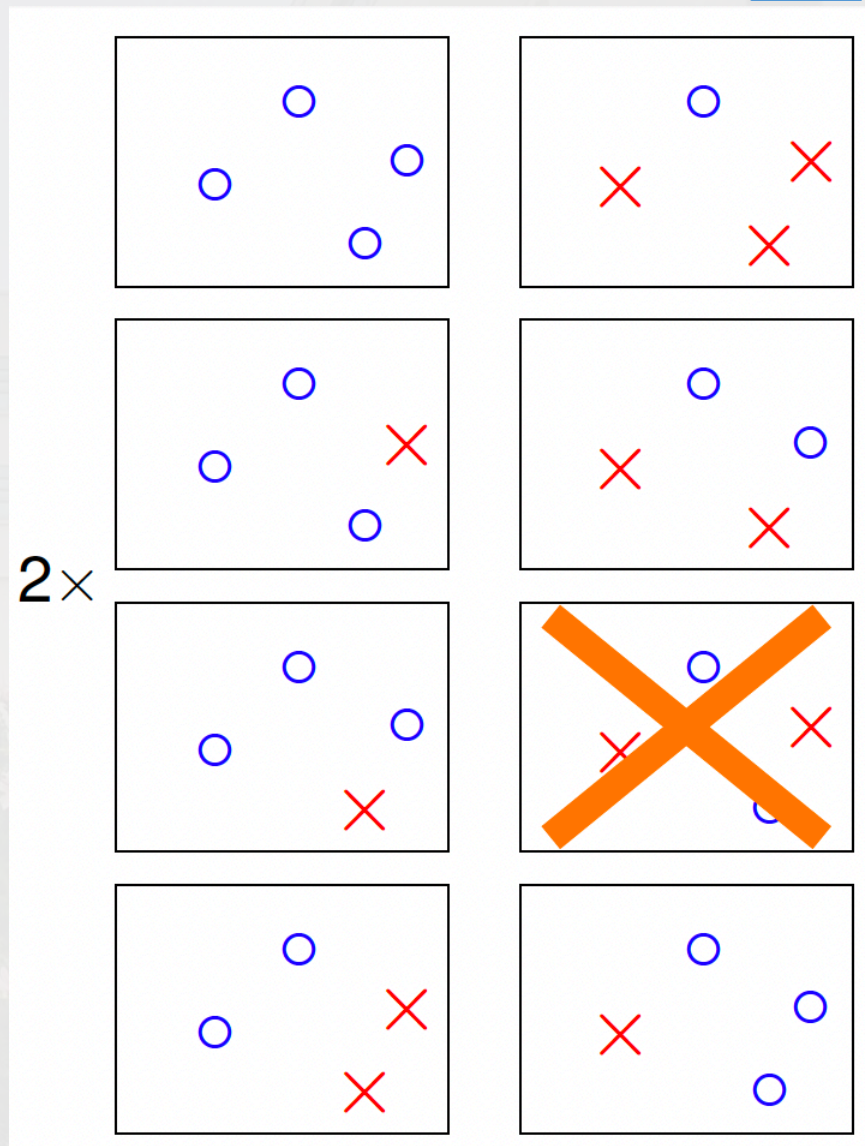


2、Hoeffding不等式与模式二分性

✓ 下面考虑4个样本的二分类模型

该模型无限多的假设可被归类为右边14种
即有效直线数量为 $effective(N) = 14$

➤ 4个样本的感知器分类模型存在
 $14 < 2^3$ 种 dichotomies



2、Hoeffding不等式与模式二分性



➤ 测验：2维平面上直线排列的4样本二分类模型存在多少 dichotomies?

2、Hoeffding不等式与模式二分性



- 用有效直线的数量 $effective(N)$ 代替 M ，霍夫定不等式可写成

$$P(|E_{in}(h) - E_{out}(h)| > \varepsilon) \leq 2effective(N) \exp(-2\varepsilon^2 N)$$

- 已知 $effective(N) \leq 2^N$ ，若能保证 $effective(N) \ll 2^N$ ，则上式右边接近于0， $E_{in}(h) \approx E_{out}(h)$ ，说明机器学习是可能的
- 2维平面上的感知器模型中， $effective(N) = |\mathcal{H}(x_1, x_2, \dots, x_N)|$ 与样本数量 N 及输入本身性质（如：排列方式）有关
- 定义成长函数 $m_{\mathcal{H}}(N) = \max_{x_1, x_2, \dots, x_N \in \mathcal{X}} |\mathcal{H}(x_1, x_2, \dots, x_N)|$ 消除对输入的依赖，其值与假设空间 \mathcal{H} 与样本数量 N 有关

2、Hoeffding不等式与模式二分性

- 用成长函数 $m_{\mathcal{H}}(N)$ 代替 M ，霍夫定不等式可写成

$$P(|E_{in}(h) - E_{out}(h)| > \varepsilon) \leq 2m_{\mathcal{H}}(N) \exp(-2\varepsilon^2 N)$$

- ✓ 若 $m_{\mathcal{H}}(N)$ 为多项式，则

$E_{in}(h) \approx E_{out}(h)$ 成立

- ✓ 若 $m_{\mathcal{H}}(N)$ 为指数函数，则

$E_{in}(h) \approx E_{out}(h)$ 不成立

- 2维平面上感知器学习模型的成长函数 $m_{\mathcal{H}}(N)$ 为：

N	$m_{\mathcal{H}}(N)$
1	2
2	4
3	$\max(\dots, 6, 8) = 8$
4	$\max(\dots, 8, 14) = 14 < 2^4$
...	...
N	$< 2^N$

2、Hoeffding不等式与模式二分性

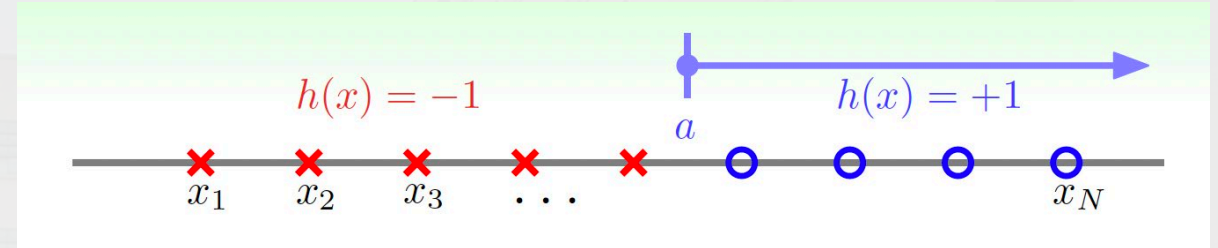


➤ 1维平面上感知器学习模型的成长函数 $m_{\mathcal{H}}(N)$

❖ Positive Rays

$$h(x) = \text{sign}(x - a)$$

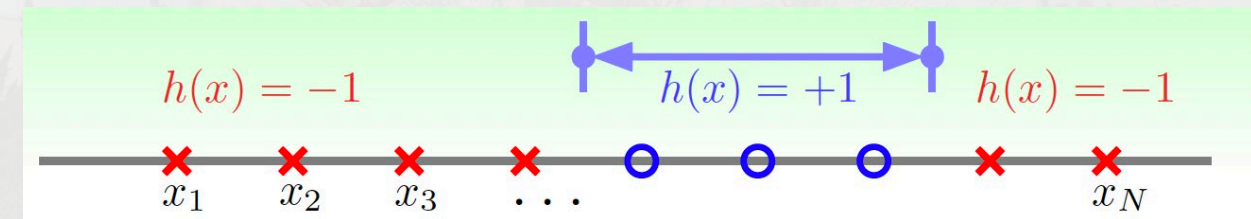
$$m_{\mathcal{H}}(N) = N + 1$$



❖ Positive Intervals

$$h(x) = \begin{cases} +1, & \text{if } x \in [l, r) \\ -1, & \text{其他} \end{cases}$$

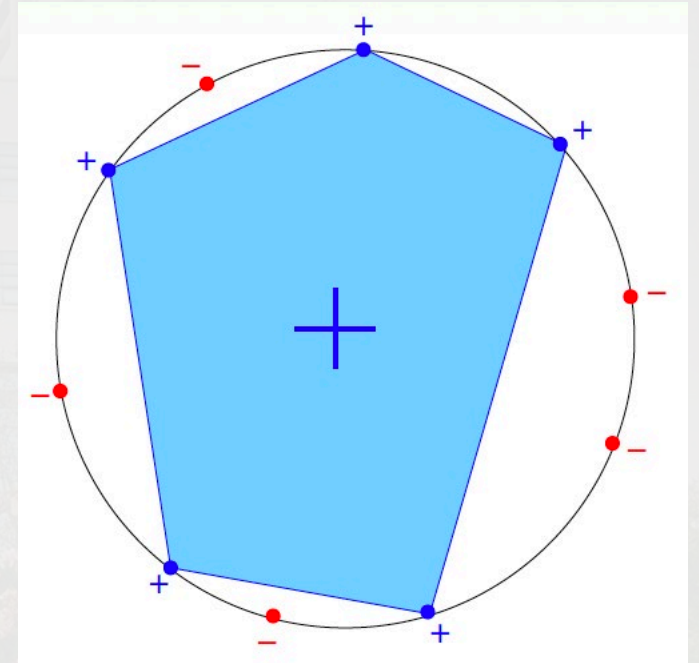
$$m_{\mathcal{H}}(N) = C_{N+1}^2 + 1 = \frac{1}{2}N^2 + \frac{1}{2}N + 1$$



2、Hoeffding不等式与模式二分性

- Convex set的成长函数 $m_{\mathcal{H}}(N)$
- ✓ 考虑一种输入：所有样本点分布在在一个圆上
- ✓ 假设空间 \mathcal{H} 为任意凸多边形，该多边形所覆盖到的点为+1，其他点为-1
- ✓ 成长函数为：

$$m_{\mathcal{H}}(N) = 2^N$$



➡ 这 N 个样本可被 \mathcal{H} 所 “打散” (shattered)

2、Hoeffding不等式与模式二分性



➤ 不同假设空间对应的成长函数 $m_{\mathcal{H}}(N)$

❖ 一维空间上positive rays

$$m_{\mathcal{H}}(N) = N + 1$$

❖ 一维空间上positive intervals

$$m_{\mathcal{H}}(N) = \frac{1}{2}N^2 + \frac{1}{2}N + 1$$

❖ Convex set

$$m_{\mathcal{H}}(N) = 2^N$$

❖ 二维平面上的感知器模型

$$m_{\mathcal{H}}(N) \leq 2^N$$

➤ 若 k 个样本的任意输入都不能被 \mathcal{H} 所打散, 即 $m_{\mathcal{H}}(k) < 2^k$
则称 k 为 \mathcal{H} 的break point (突破点), 且 $k + 1, k + 2, \dots$ 也是break point。我们关注最小的break point

2、Hoeffding不等式与模式二分性

➤ 不同假设空间对应的最小break point

❖ positive rays

$$m_{\mathcal{H}}(N) = N + 1$$

2

❖ positive intervals

$$m_{\mathcal{H}}(N) = \frac{1}{2}N^2 + \frac{1}{2}N + 1$$

3

❖ Convex set

$$m_{\mathcal{H}}(N) = 2^N$$

\

❖ 二维平面上的感知器模型

$$m_{\mathcal{H}}(N) \leq 2^N$$

4

➤ **定理**：若存在break point $k \geq 3$ ，且 $N \geq 2$ ，则 $m_{\mathcal{H}}(N) \leq N^{k-1}$

证明可参考：**Learning from data**, 2012, Abu-Mostafa et al.

➡ 若对于 \mathcal{H} 存在break point k ，则 $E_{\text{in}}(g) \approx E_{\text{out}}(g)$

2、Hoeffding不等式与模式二分性



- 测验：直线排列的二分类模型中考虑假设空间 \mathcal{H} 为positive and negative rays, 即 $h(x) = \pm \text{sign}(x - a)$, 其成长函数 $m_{\mathcal{H}}(N) = ?$,

A、 N

B、 $N + 1$

C、 $2N$

D、 2^N



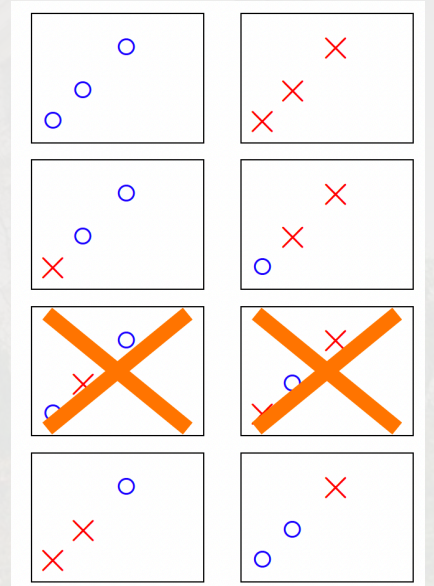
\mathcal{H} 最小的break point是多少?

A、1

B、2

C、3

D、4



如3样本情形

3、VC维理论与模型复杂性



- 前面的论述用 $m_{\mathcal{H}}(N)$ 代替 M ，从 \mathcal{H} 中选取学习函数 g ，有

$$P(|E_{in}(g) - E_{out}(g)| > \varepsilon) \leq 2m_{\mathcal{H}}(N) \exp(-2\varepsilon^2 N)$$

但直接替换是有问题的，Vapnik 和 Chervonenkis 提出并完整地证明准确的式子如下（具体证明参考论文[Vapnik et al. 1971]）

$$P(|E_{in}(g) - E_{out}(g)| > \varepsilon) \leq 2 \cdot 2m_{\mathcal{H}}(2N) \exp\left(-2 \cdot \frac{1}{16} \varepsilon^2 N\right)$$

- 上式右边是 **VC Bound**，若存在 break point $k \geq 3$ ，则

$$P(|E_{in}(g) - E_{out}(g)| > \varepsilon) \leq 4(2N)^{k-1} \exp\left(-\frac{1}{8} \varepsilon^2 N\right)$$

3、VC维理论与模型复杂性



➤ VC维 (VC Dimension) 的定义

假设空间 \mathcal{H} 的VC维 $d_{VC}(\mathcal{H})$ 表示 \mathcal{H} 所能“打散” (Shatter) 的最大样本数 N_s ，即 ($d_{VC} = N_s$)

N_s 是使得 $m_{\mathcal{H}}(N_s) = 2^{N_s}$ 成立的最大值

➤ $d_{VC}(\mathcal{H}) = \text{最小的break point } k - 1$

➤ 若 $N_s \geq 2$ ，即 $d_{VC} \geq 2$ ，则 $m_{\mathcal{H}}(N) \leq N^{d_{VC}}$

3、VC维理论与模型复杂性

➤ 不同假设空间对应的VC维

❖ positive rays

$$m_{\mathcal{H}}(N) = N + 1$$

$$d_{VC} = 1$$

❖ positive intervals

$$m_{\mathcal{H}}(N) = \frac{1}{2}N^2 + \frac{1}{2}N + 1$$

$$d_{VC} = 2$$

❖ Convex set

$$m_{\mathcal{H}}(N) = 2^N$$

$$d_{VC} = \infty$$

❖ 二维平面上的感知器模型

$$m_{\mathcal{H}}(N) \leq N^3, \text{对于 } N \geq 2$$

$$d_{VC} = 3$$

$$P(|E_{in}(g) - E_{out}(g)| > \varepsilon) \leq 4(2N)^{d_{VC}} \exp\left(-\frac{1}{8}\varepsilon^2 N\right)$$

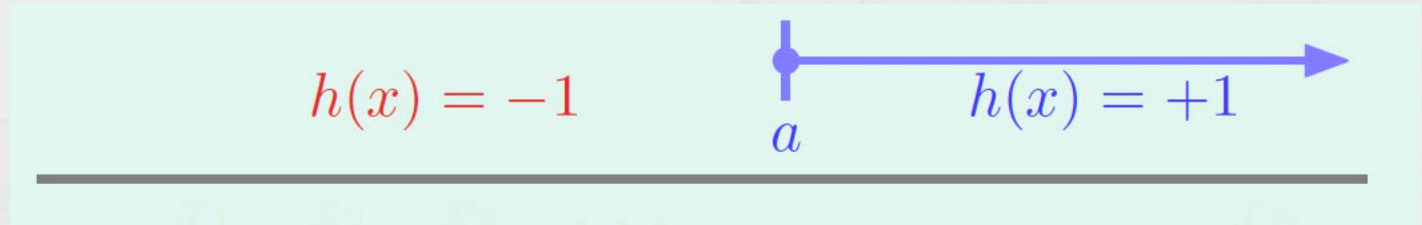
➤ 若VC维 d_{VC} 有限，则在样本数 N 大的情况下： $E_{in}(g) \approx E_{out}(g)$

3、VC维理论与模型复杂性



➤ VC维可能的物理意义

❖ positive rays

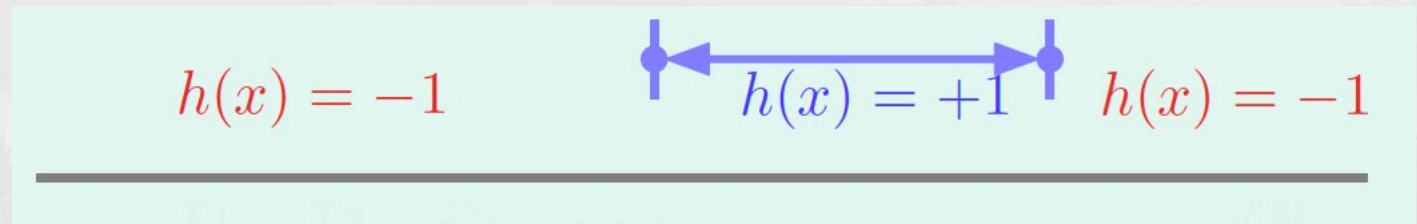


$$d_{VC} = 1$$

$$h(x) = \text{sign}(x - a)$$

自由参数: a

❖ positive intervals



$$d_{VC} = 2$$

$$h(x) = \begin{cases} +1, & \text{if } x \in [l, r) \\ -1, & \text{其他} \end{cases}$$

自由参数: l, r

VC维 $d_{VC} \approx$ 自由参数的数量 (并不总是成立)

3、VC维理论与模型复杂性



➤ M 与VC维 d_{VC} 对机器可学习性的影响，机器可学习说明

- 1) 预测误差接近于训练误差 $E_{out}(h) \approx E_{in}(h)$;
- 2) \mathcal{H} 存在可选的某假设 g 使得训练误差足够小 $E_{in}(g) \approx 0$

M 小

- 1) 满足, $P(BAD) \leq 2M \exp(\dots)$
- 2) 不一定满足, 假设空间选择太少

M 大

- 1) 不满足, $P(BAD) \leq 2M \exp(\dots)$
- 2) 满足, 假设空间选择很多

d_{VC} 小

- 1) 满足, $P(BAD) \leq 4(2N)^{d_{VC}} \exp(\dots)$
- 2) 不一定满足, 假设空间有效模式少

d_{VC} 大

- 1) 不满足, $P(BAD) \leq 4(2N)^{d_{VC}} \exp(\dots)$
- 2) 满足, 假设空间有效模式多

3、VC维理论与模型复杂性



➤ 重写VC Bound

$$P(|E_{in}(g) - E_{out}(g)| > \varepsilon) \leq 4(2N)^{d_{VC}} \exp\left(-\frac{1}{8}\varepsilon^2 N\right)$$

$$\text{➤ 令 } 4(2N)^{d_{VC}} \exp\left(-\frac{1}{8}\varepsilon^2 N\right) = \delta \quad \Rightarrow \quad \varepsilon = \sqrt{\frac{8}{N} \ln\left(\frac{4(2N)^{d_{VC}}}{\delta}\right)}$$

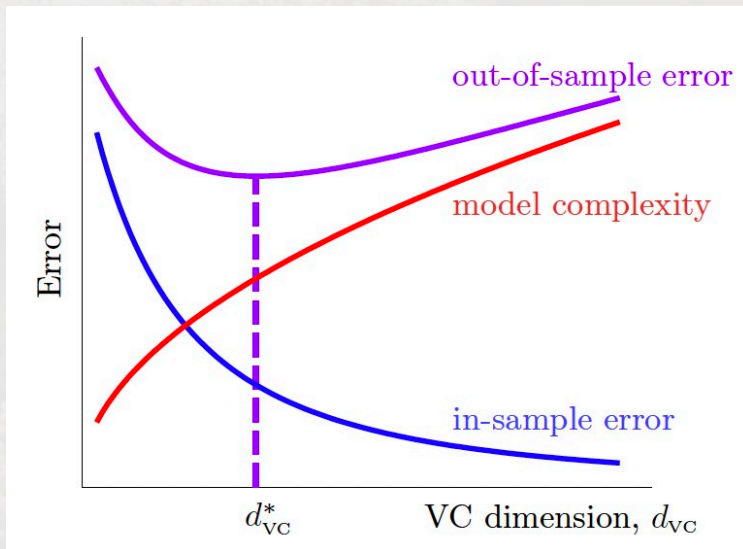
➤ 霍夫丁不等式表示坏事件发生的概率， $|E_{in}(h) - E_{out}(h)| \leq \varepsilon$ 则表示好事发生，即样本预测误差与训练误差相当，有

$$E_{in}(g) - \sqrt{\frac{8}{N} \ln\left(\frac{4(2N)^{d_{VC}}}{\delta}\right)} \leq E_{out}(g) \leq E_{in}(g) + \sqrt{\frac{8}{N} \ln\left(\frac{4(2N)^{d_{VC}}}{\delta}\right)}$$

3、VC维理论与模型复杂性



- 式子 $\Omega(N, \mathcal{H}, \delta) = \sqrt{\frac{8}{N} \ln\left(\frac{4(2N)^{d_{VC}}}{\delta}\right)}$ 表示**模型复杂度**
- 预测误差 $E_{out}(g) \leq E_{in}(g) + \sqrt{\frac{8}{N} \ln\left(\frac{4(2N)^{d_{VC}}}{\delta}\right)}$
- 误差 $E_{out}(g)$ 和 $E_{in}(g)$, **模型复杂度 Ω** 与 **VC维** 的关系如下:



- $d_{VC} \uparrow$: $\Omega \uparrow$, $E_{in} \downarrow$
- $d_{VC} \downarrow$: $\Omega \downarrow$, $E_{in} \uparrow$
- 最好的 d_{VC}^* 是中间某个值

3、VC维理论与模型复杂性



➤ 测验：若 $d_{VC} \leq d + 1$ ，下面哪个说法是正确的？

- A、存在某个或某些 $d + 1$ 数量的输入能被“打散”
- B、任何数量为 $d + 1$ 的输入都能被“打散”
- C、存在某个或某些 $d + 2$ 数量的输入不能被“打散”
- ✓ D、任何数量为 $d + 2$ 的输入都不能被“打散”

□ 机器可学习性分析: $E_{\text{out}}(g) \approx E_{\text{in}}(g) \approx 0$

- ✓ 当假设空间规模 M 有限时, 由霍夫定不等式 $P(|E_{\text{in}}(h) - E_{\text{out}}(h)| > \varepsilon) \leq 2M \exp(-2\varepsilon^2 N)$ 可知存在 $E_{\text{in}}(g) \approx E_{\text{out}}(g)$
- ✓ 当 M 无限时, 若假设空间 \mathcal{H} 存在break point, 即其VC维有限, 则其成长函数 $m_{\mathcal{H}}(N)$ 为多项式函数, 机器可学习
- ✓ VC维 d_{VC} 对模型复杂度及模型误差均有影响, 存在使得预测误差最小的中间值 d_{VC}^*