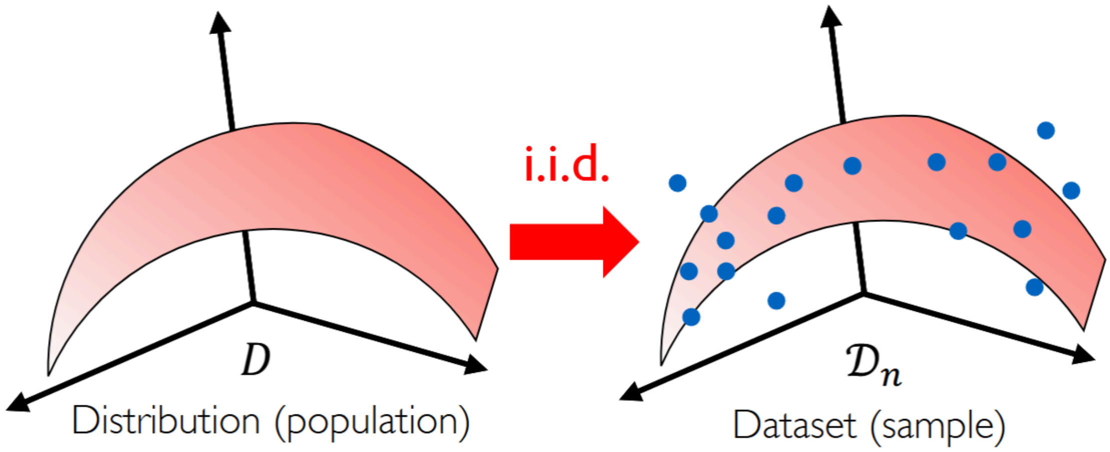
Learning Theory

> 作者：Alex
>
> 联系方式：`wang-zx23@mails.tsinghua.edu.cn`

0 简介

离散数学是计算机科学的数学基础，概率和统计是现代主流机器学习的数学基础。本笔记旨在从基本的概率论不等式出发，简要梳理学习理论的脉络。

- 机器学习的基本假设：

> 训练样本、测试样本均是从某一未知分布$(x,y)\sim D_{X\times Y}$中随机采样得到的，满足独立同分布假设。
>
> 
>
>
> 机器**学习**（learning）并非是对数据的**拟合**（fitting）,我们希望模型具有**OOD**（**out of distribution**）泛化性。我们将模型在dataset上的表现用**损失函数**（**loss function**)来度量。

> *Definition 1*
>
> 期望误差（Expected error）：$\varepsilon(h)=\mathbb{E}_{(x,y)\sim D(x,y)}\ell(h(x),y)$
>
> 经验误差（Empirical error）：$\hat{\varepsilon}_{\mathcal{D}_n}(h)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(h(x_i),y_i)$

我们的目标是找到一族参数，使得假设在分布上的期望误差达到最小，即$h^*=\arg\min\varepsilon(h)$；期望误差相当于对分布$D$上的所有样本（无穷个）对应的损失函数值求期望。倘若我们能够使得期望误差达到最小，就意味着我们找到了一个对于整个分布 D 都行之有效的假设函数$h(x)$。然而，期望误差无法计算，实际工作中都是计算经验误差，对采样到的有限条样本计算损失函数值，更多的做法考虑到有限的算力，都只在一个batch上计算。实际上，经验误差是对期望误差的**无偏估计**（**unbiased estimator**）,即$\varepsilon(h)=E_{D_n\sim D^n}\hat{\varepsilon}_{\mathcal{D}_n}(h)$，我们有理由

相信它能够较好地反映出期望误差。实际上，这就是学习理论讨论的核心问题。

1 偏差-方差分解

- 贝叶斯决策准则

若我们知道样本是从哪个分布中采样得到的，就可以依据该分布，计算出样本对应的条件概率，并取其中的最大值作为样本的标签，即 $h_{Bayes}(x) = \arg\max_y P(y \mid x)$。

- 回归问题的二范数损失函数

对于给定输入 x，我们利用 $h_{\mathcal{D}_n}(x)$ 计算它所对应的输出 y。$h_{\mathcal{D}_n}$ 表示在数据集 $\mathcal{D}_n$ 上训练得到的模型，$\mathcal{D}_n$ 本身则是从分布 D 中随机采样得到的。对于不同的 $\mathcal{D}_n$，我们采样得到的数据集是不一样的。因此，$h_{\mathcal{D}_n}(x)$ 是一个随机变量，可以对其求期望与方差。进一步，定义 $Regression \quad function: f^*(x) = \mathbb{E}_y[y|x]$，表示在已知样本的生成分布 D 时，对于给定的数据 x，输出值 y 的期望，这也是所有的回归任务希望逼近的目标（上标 $*$ 代表最优）

对于回归问题，我们可以采用 $L2$ 作为损失函数

$$
\begin{gathered}
(*) = \mathbb{E}_{D_n,y}\left[\left(h_{D_n}(x)-y\right)^2|x\right] = \mathbb{E}_{D_n,y}\left[\left(h_{D_n}(x)-f^*(x)+f^*(x)-y\right)^2|x\right] \\
= \mathbb{E}_{D_n,y}\left[\left(h_{D_n}(x)-f^*(x)\right)^2+\left(f^*(x)-y\right)^2+2\left(h_{D_n}(x)-f^*(x)\right)\left(f^*(x)-y\right)|x\right] \\
= \mathbb{E}_{D_n}\left[\left(h_{D_n}(x)-f^*(x)\right)^2|x\right]+\mathbb{E}_y\left[\left(f^*(x)-y\right)^2|x\right]+2\mathbb{E}_{D_n,y}\left[\left(h_{D_n}(x)-f^*(x)\right)\left(f^*(x)-y\right)|x\right] \\
2\mathbb{E}_{D_n,y}\left[\left(h_{D_n}(x)-f^*(x)\right)\left(f^*(x)-y\right)|x\right] = 2\mathbb{E}_{D_n}\left[h_{D_n}(x)-f^*(x)|x\right]\mathbb{E}_y\left[f^*(x)-y|x\right] \\
\because Regression \quad function: f^*(x) = \mathbb{E}_y[y|x] \\
\therefore \mathbb{E}_y\left[f^*(x)-y|x\right] = \mathbb{E}_y\left[f^*(x)|x\right]-\mathbb{E}_y\left[y|x\right] = 0 \\
(*) = \mathbb{E}_{D_n}\left[\left(h_{D_n}(x)-f^*(x)\right)^2|x\right]+\mathbb{E}_y\left[\left(f^*(x)-y\right)^2|x\right]
\end{gathered}
$$

其中，$\mathbb{E}_y\left[\left(f^*(x)-y\right)^2|x\right]$ 是贝叶斯错误率的来源，即 y 中存在噪音。根据方差及 $f^*(x)$ 的定义，该式也可写作 $Var(y|x)$

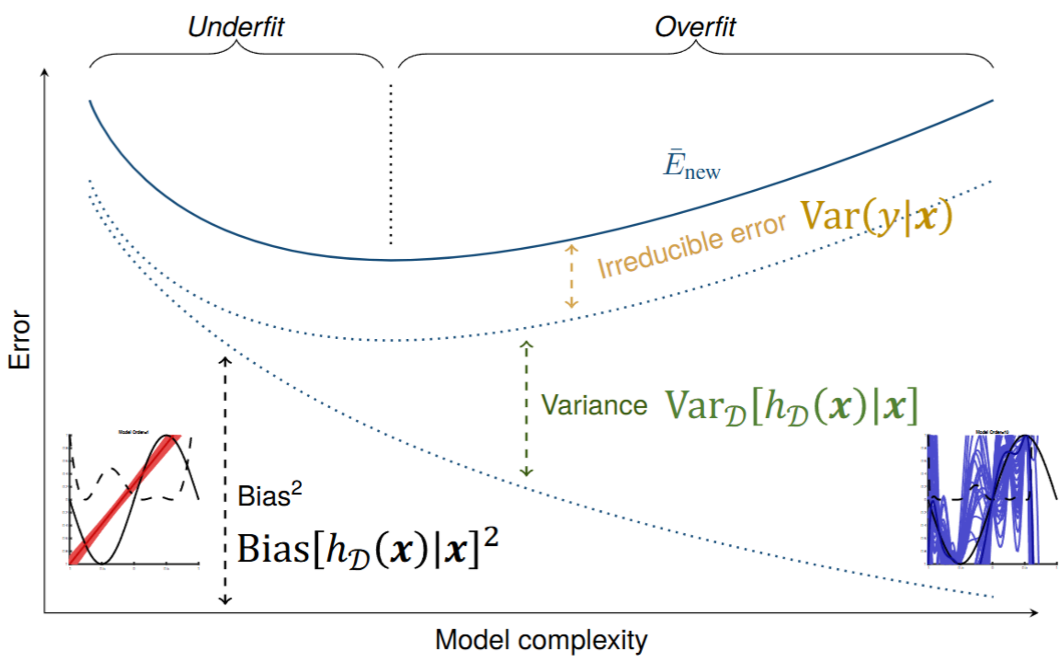
继续考察第一项 $\mathbb{E}_{D_n}\left[\left(h_{D_n}(x)-f^*(x)\right)^2|x\right]$，我们采用相同的方法对其进行处理

$$
\begin{gathered}
\mathbb{E}_{D_n}\left[\left(h_{D_n}(x)-f^*(x)\right)^2|x\right] \\
= \mathbb{E}_{D_n}\left[\left(h_{D_n}(x)-E_{D_n}\left[h_{D_n}(x)\right]+E_{D_n}\left[h_{D_n}(x)\right]-f^*(x)\right)^2|x\right] \\
= \mathbb{E}_{D_n}\left[\left(h_{D_n}(x)-E_{D_n}\left[h_{D_n}(x)\right]\right)^2|x\right]+\mathbb{E}_{D_n}\left[\left(E_{D_n}\left[h_{D_n}(x)\right]-f^*(x)\right)^2|x\right] \\
+2\mathbb{E}_{D_n}\left[h_{D_n}(x)-E_{D_n}\left[h_{D_n}(x)\right]|x\right]\cdot\mathbb{E}_{D_n}\left[E_{D_n}\left[h_{D_n}(x)\right]-f^*(x)|x\right] \quad (5) \\
\mathbb{E}_{D_n}\left[h_{D_n}(x)-E_{D_n}\left[h_{D_n}(x)\right]|x\right] = \mathbb{E}_{D_n}\left[h_{D_n}(x)|x\right]-\mathbb{E}_{D_n}\left[h_{D_n}(x)|x\right] = 0 \\
(5) = \mathbb{E}_{D_n}\left[\left(h_{D_n}(x)-E_{D_n}\left[h_{D_n}(x)\right]\right)^2|x\right]+\mathbb{E}_{D_n}\left[\left(E_{D_n}\left[h_{D_n}(x)\right]-f^*(x)\right)^2|x\right]
\end{gathered}
$$

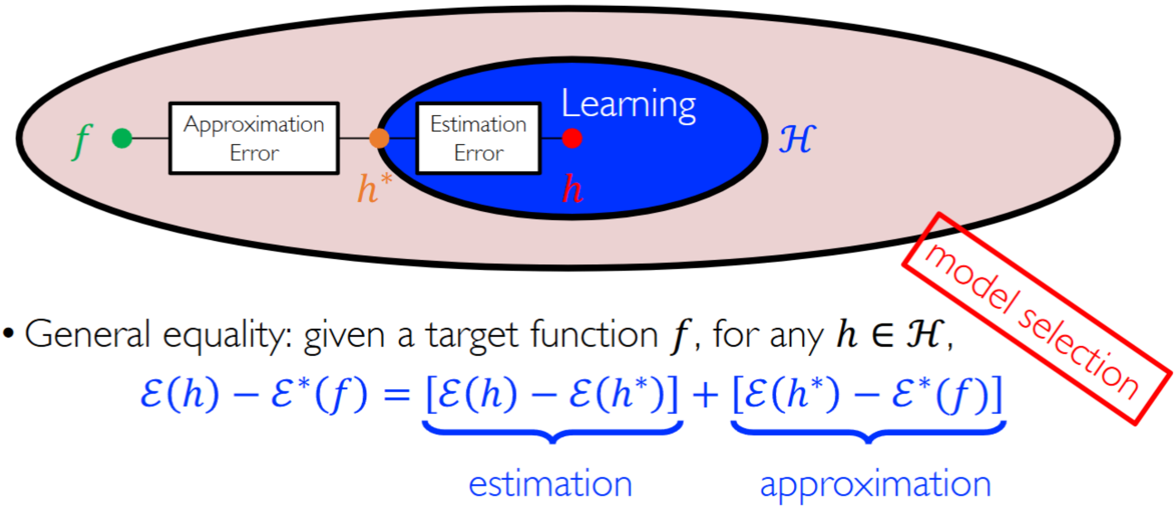
其中，$\mathbb{E}_{D_n}\left[\left(h_{D_n}(x)-E_{D_n}\left[h_{D_n}(x)\right]\right)^2|x\right]$ 形式上就是方差的定义式，记作 $Var_D[h_D(x)|x]$（由于是对所有的 D_n 求期望，因此得到的就是 D）该式可以反映模型对分布 D 上的不同数据集的鲁棒性质。$\mathbb{E}_{D_n}\left[\left(E_{D_n}\left[h_{D_n}(x)\right]-f^*(x)\right)^2|x\right]$ 则是偏差平方，即从训练集学习到的 h_{D_n} 与真值函数 f^* 之间的差距。

回归问题的期望误差由三部分组成：

$$
\varepsilon_{L2}(x) = Var(y|x)+Bias\left[h_D(x)|x\right]^2+Var_D\left[h_D(x)|x\right]
$$



反映在实际操作中一般表现为简单模型偏差大、方差小；复杂模型偏差小、方差大。



用这张图片我们可以很好地看出目标函数、假设空间、估计误差、近似误差这些概念之间的关系。我们如下介绍的学习理论实际上都是希望对于对于估计误差$\varepsilon(h) - \varepsilon^*(h)$给出了一个界。

---

2 常用不等式

2.1 Tail Estimation

Markov's Inequality

$$\Pr\{X \geq \varepsilon\} \leq \frac{\mathbb{E}[X]}{\varepsilon}$$

> proof:

$$\mathbb{E}[X] = \int_0^\infty \Pr\{X \geq t\}dt \geq \int_\varepsilon^\infty \Pr\{X \geq t\}dt \geq \varepsilon \Pr\{X \geq \varepsilon\}$$

Chebyshev's Inequality

> Chebyshev's Lemma:

$$\Phi(x) \text{ is a non-decreasing, non-negative function}$$
$$\Pr\{X \geq \varepsilon\} = \Pr\{\Phi(X) \geq \Phi(\varepsilon)\} \leq \frac{\mathbb{E}[\Phi(X)]}{\Phi(\varepsilon)}$$
$$\Pr\{|X - \mu| \geq \varepsilon\} \leq \frac{\sigma^2}{\varepsilon^2}$$

> proof:

$$\text{version 1(by Markov's inequality):}$$
$$\Pr\{|X - \mu| \geq \varepsilon\} = \Pr\{(X - \mu)^2 \geq \varepsilon^2\} \leq \frac{\mathbb{E}[(X-\mu)^2]}{\varepsilon^2} = \frac{\sigma^2}{\varepsilon^2}$$
$$\text{version 2(by Lemma):}$$
$$\Pr\{|X - \mu| \geq \varepsilon\} = \Pr\{\Phi(|X - \mu|) \geq \Phi(\varepsilon)\} \leq \frac{\mathbb{E}[\Phi(|X - \mu|)]}{\Phi(\varepsilon)}$$
$$\Phi(t) = t^2 \text{ is a non-decreasing, non-negative function}$$
$$\mathbb{E}[\Phi(|X - \mu|)] = \mathbb{E}[(X - \mu)^2] = \sigma^2$$
$$\Pr\{|X - \mu| \geq \varepsilon\} \leq \frac{\sigma^2}{\varepsilon^2}$$

Chernoff Bounds (version 1)

$$\Pr\{\Sigma_i(X_i - E[X_i]) \geq \varepsilon\} \leq \frac{\prod_i E(e^{\lambda(X_i - E[X_i])})}{e^{\lambda\varepsilon}}$$

> proof:

by Chebyshev's Lemma, let $\Phi(t) = e^{\lambda t}$, then $\Pr\{\Sigma_i(X_i - E[X_i]) \geq \varepsilon\} \leq \frac{E(e^{\lambda\Sigma_i(X_i - E[X_i])})}{e^{\lambda\varepsilon}} = \frac{E(\prod_i e^{\lambda(X_i - E[X_i])})}{e^{\lambda\varepsilon}} = \frac{\prod_i E(e^{\lambda(X_i - E[X_i}}{e^{\lambda\varepsilon}}$

Chernoff Bounds (version 2)

$X=\Sigma_i X_i, X_i\in\{0,1\}, \Pr\{X_i=1\}=p_i, X_i$ are i.i.d.,Let $\mu=\mathbb{E}[X]=\Sigma_i p_i$. Then:

$$\text{upper bound}: \Pr\{X\geq(1+\delta)\mu\}\leq(\frac{e^\delta}{(1+\delta)^{1+\delta}})^\mu, \forall\delta>0$$
$$\text{lower bound}: \Pr\{X\leq(1-\delta)\mu\}\leq(\frac{e^{-\delta}}{(1-\delta)^{1-\delta}})^\mu, \forall 0\leq\delta<1$$

> proof:

$$\Pr\{X\geq(1+\delta)\mu\}=\Pr\{e^{tX}\geq\exp(t(1+\delta)\mu)\}\leq\frac{\mathbb{E}[e^{tX}]}{e^{t(1+\delta)\mu}}$$
$$E(e^{tX})=\prod_i E(e^{tX_i})=\prod_i(1-p_i+p_ie^t)=\prod_i(1-p_i+p_ie^t)$$
$$\text{In consider of } e^t\geq t+1, \text{let } t=e^{p_i(e^t-1)}$$
$$\prod_i(1-p_i+p_ie^t)=\prod_i(1+p_i(e^t-1))\leq\prod_i e^{p_i(e^t-1)}=e^{\mu(e^t-1)}=e^{f(t)}$$
$$f(t)=\mu(e^t-1)-t(1+\delta)\mu$$
$$t_0=\ln(1+t), f(t)\leq f(t_0)$$
$$\Pr\{X\geq(1+\delta)\mu\}\leq e^{f(t_0)}=(\frac{e^\delta}{(1+\delta)^{1+\delta}})^\mu, \forall\delta>0$$
$$z$$

Hoeffding's Inequality

> Hoeffding's Lemma:

$$\text{V is a random bounded variable, } E[V]=0, a\leq V\leq b, b>a$$
$$E(e^{\lambda V})\leq e^{\frac{\lambda^2}{8}(b-a)^2}$$

> proof:

$$\Phi(\lambda)=\ln[\frac{be^{\lambda a}}{b-a}+\frac{-ae^{\lambda b}}{b-a}]$$
$$\Phi'(\lambda)=a-\frac{a}{(b-a)(be^{-\lambda(b-a)}-a)}$$
$$\Phi(0)=\Phi'(0)=0, \Phi''(\lambda)\leq 1$$
$$\Phi(\lambda)=\Phi(0)+\lambda\Phi'(0)+\frac{\lambda^2}{2}\Phi''(\theta)\leq e^{\frac{\lambda^2}{8}(b-a)^2}$$
$$V\rightarrow e^{\lambda V} \text{ is a convex function}$$
$$e^{\lambda V}\leq\frac{b-V}{b-a}e^{\lambda a}+\frac{V-a}{b-a}e^{\lambda b}$$
$$E(e^{\lambda V})\leq E(\frac{b-V}{b-a}e^{\lambda a}+\frac{V-a}{b-a}e^{\lambda b})=\Phi(\lambda)\leq e^{\frac{\lambda^2}{8}(b-a)^2}$$

> Hoeffding's Inequality:

$$\text{For } a_i\leq X_i\leq b_i, \Pr\{|\Sigma_i^n(X_i-EX_i)|\geq\varepsilon\}\leq 2e^{-\frac{2\varepsilon^2}{\Sigma_i^n(b_i-a_i)^2}}$$

> proof:

$$\text{From Hoeffding's Lemma: } E(e^{\lambda V})\leq e^{\frac{\lambda^2}{8}(b-a)^2}$$
$$\text{For n r.v. } X_i,\quad a_i\leq X_i\leq b_i,\quad \text{Let } V=\Sigma_i^n(X_i-EX_i)$$
$$\frac{\prod_{i=1}^n\mathbb{E}[e^{\lambda(X_i-EX_i)}]}{e^{\lambda\varepsilon}}\leq e^{\frac{\lambda^2}{8}\Sigma_i^n(b_i-a_i)^2-\lambda\varepsilon}$$
$$\text{Let } g(\lambda)=\frac{\lambda^2}{8}\Sigma_i^n(b_i-a_i)^2-\lambda\varepsilon$$
$$g(\lambda)\leq g(\lambda_0)=g(\frac{4\varepsilon}{\Sigma_i^n(b_i-a_i)^2})=\frac{\varepsilon^2}{\Sigma_i^n(b_i-a_i)^2}$$
$$\text{Thus, } \Pr\{\Sigma_i^n(X_i-EX_i)\geq\varepsilon\}\leq e^{-2\frac{\varepsilon^2}{\Sigma_i^n(b_i-a_i)^2}}$$
$$\text{Thus, } \Pr\{\Sigma_i^n(X_i-EX_i)\geq-\varepsilon\}\leq e^{-2\frac{\varepsilon^2}{\Sigma_i^n(b_i-a_i)^2}}$$
$$\text{For } a_i\leq X_i\leq b_i, \Pr\{|\Sigma_i^n(X_i-EX_i)|\geq\varepsilon\}\leq 2e^{-\frac{2\varepsilon^2}{\Sigma_i^n(b_i-a_i)^2}}$$

McDiarmid's Inequality

$$X_1, X_2, \cdots, X_n \text{ are i.i.d. random variables, } f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \text{ is a stable function,}$$
$$\sup_{X_1,\cdots,X_i',X_n} |f(X_1, X_2, \cdots, X_n) - f(X_1, \cdots, X_i', \cdots, X_n)| \leq c_i, \forall i \in \{1, 2, \cdots, n\}$$
$$\text{Theorem: } \Pr\{|f(X_1, X_2, \cdots, X_n) - \mathbb{E}[f(X_1, X_2, \cdots, X_n)]| \geq \varepsilon\} \leq 2e^{-\frac{2\varepsilon^2}{\sum_{i=1}^n c_i^2}}$$

> proof:

$$\text{Use Hoeffding's Inequality, let } \{c_i = b_i - a_i\}$$

Mill's Inequality

$$Z \sim \mathcal{N}(0,1), \quad \Pr\{P(|Z| \geq t)\} \leq \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\frac{t^2}{2}}/t$$

> proof:

$$\mathrm{P}(|Z| \geq t) = 2\mathrm{P}(Z^2 \geq t^2) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_t^\infty e^{-\frac{x^2}{2}} dx$$
$$I = \int_t^\infty e^{-\frac{x^2}{2}} dx = \int_t^\infty \frac{1}{x}(xe^{-\frac{x^2}{2}})dx = \frac{e^{-\frac{t^2}{2}}}{t} - \int_t^\infty \frac{1}{x^2}(e^{-\frac{x^2}{2}})dx$$
$$\text{Thus } \Pr\{P(|Z| \geq t)\} \leq \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\frac{t^2}{2}}/t$$

Bernoulli's Inequality

$$Let X_1, X_2, \cdots, X_n \text{ be Bernoulli random variables, } X_i \sim \mathcal{B}ernoulli(p)$$
$$\forall \varepsilon > 0, \Pr\{|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n X_i - p| \geq \varepsilon\} \leq 2e^{-2n\varepsilon^2}$$

· more about tail bound theory:

```
https://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/classes/mlds_2019/III-Tail-Bounds.pdf
```

2.2 Other Inequalities

Jensen's Inequality

对凸函数f（def：$\forall \lambda \in [0,1]$，有$f$lambda x + (1-\lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y)$

$$f(\mathbb{E}[X]) \leq \mathbb{E}[f(X)]$$

Union bound

$$\Pr\{A \cup B\} \leq \Pr\{A\} + \Pr\{B\}$$
$$\Pr\{A \cap B\} = 1 - \Pr\{\neg(A \cap B)\} = 1 - \Pr\{A^c \cup B^c\} \geq 1 - \Pr\{A^c\} - \Pr\{B^c\}$$

Inversion rule

Let $\delta = f$varepsilon)$

$$\Pr\{X \geq \varepsilon\} \leq f(\varepsilon) \iff \Pr\{X \leq f^{-1}(\delta)\} \geq 1 - \delta$$

Cauchy-Schwarz Inequality

$$\mathbb{E}[XY] \leq \sqrt{\mathbb{E}[X^2]\mathbb{E}[Y^2]}$$

3 PAC可学习

- PAC是概率近似正确学习(Probabilistic Approximate Correct Learning)的缩写。

> Definition:

A hypothesis space $\mathcal{H}$ is **PAC-learnable** if there exists an algorithm $\mathcal{A}$ and a polynomial function $\text{poly}()$, such that for any $\varepsilon > 0$, $\delta > 0$, for all distributions D on $\mathcal{X}$ and for any target hypothesis $h \in \mathcal{H}$, the following holds for sample complexity $n \geq \text{poly}(\frac{1}{\varepsilon}, \frac{1}{\delta}, |\mathcal{H}|)$:

$P_{\mathcal{D}_n \sim D^n}[\mathcal{E}(h_{\mathcal{D}_n}) - \min_{h\in\mathcal{H}} \mathcal{E}(h) \geq \varepsilon] \leq \delta$

Where:

- $h^* = \text{argmin}_{h\in\mathcal{H}} \mathcal{E}(h)$
- "Approximately correct" refers to the error bound ε

- "Probably correct" refers to the confidence bound δ

对PAC可学习的通俗理解:对于一个较好的假设空间，总能以较大的概率保证期望误差与经验误差只相差一个小量。PAC学习理论为机器学习提供了重要的理论基础。有了前面的不等式基础，我们将导出有限假设空间的泛化误差界，并--证明有限假设空间是PAC可学习的.

4 有限假设空间泛化误差界

4.1 单一假设空间

我们用已经导出的**Hoeffding's Inequality**来推导单一假设下的泛化误差上界。

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

令$X_i=\ell(h(x_i),y_i$,我们看出

$$\sum_{i=1}^{n}\left(X_i-\mathbb{E}X_i\right)=n\left\{\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\ell(h(x_i),y_i)\right]-\mathbb{E}_{(x,y)\sim D}\ell(h(x),y)\right\}=n\left(\hat{\varepsilon}_{D_n}(h)-\varepsilon(h)\right)$$

由$X_i=\ell(h(x_i),y_i\in[0,1]=[a_i,b_i]$,可以得到 $\Pr\{|\left(\hat{\varepsilon}_{D_n}(h)-\varepsilon(h)\right)|\geq\varepsilon\}\leq 2e^{-2n\varepsilon^2}$

希望 $\left|\hat{\varepsilon}_{D_n}(h)-\varepsilon(h)\right|\geq\epsilon$ 是一个小概率事件，如此就能保证我们在一个有限的数据集上训练得到的模型，其经验误差偏离期望误差较大的情况，发生可能性很小。通俗的理解是能在采样得到的数据集上训练出靠谱的模型）

$$\begin{aligned}&\text{Let}\quad\delta=P\left(\left|\hat{\varepsilon}_{D_n}(h)-\varepsilon(h)\right|\geq\epsilon\right)\\&\text{Then}\quad\delta\leq 2e^{-2n\epsilon^2}\Rightarrow\epsilon\leq\frac{\log\frac{2}{\delta}}{2n}\end{aligned}$$

实际上j就是应用Inversion rule,我们可以得到$\varepsilon(h)\leq\hat{\varepsilon}_{D_n}(h)+\frac{\log\frac{2}{\delta}}{2n}$至少以 $1-\delta$ 的概率发生。这也是所谓可能正确学习理论的含义。上述推导中，我们假设 h 是固定的，即设假设空间中只有一个假设，但在实际场景中，h 实则是一个随机变量，我们一般取 h 为

$$\mathcal{D}_n\to h_{\mathcal{D}_n}=\arg\min_{h\in\mathcal{H}}\hat{\varepsilon}_{\mathcal{D}_n}(h)$$

即在函数族 $\mathcal{H}$ 中，选择于 $\mathcal{D}_n$ 上经验误差最小的 h。这时候需要采用保守学习的思想，考虑最坏的情形，来获得松弛的上界。

4.2 多假设的有限假设空间

$$\begin{aligned}&P\left(\exists h\in\mathcal{H},\left|\hat{\varepsilon}_{D_n}(h)-\varepsilon(h)\right|\geq\epsilon\right)=P\left(\sup_{h\in\mathcal{H}}\left|\hat{\varepsilon}_{D_n}(h)-\varepsilon(h)\right|\geq\epsilon\right)\quad(1)\\&=P\left(\left[\left|\hat{\varepsilon}_{D_n}(h_1)-\varepsilon(h_1)\right|\geq\epsilon\right]\vee\ldots\vee\left[\left|\hat{\varepsilon}_{D_n}(h_{|\mathcal{H}|})-\varepsilon(h_{|\mathcal{H}|})\right|\geq\epsilon\right]\right)\quad(2)\\&\leq\sum_{h\in\mathcal{H}}P\left(\left|\hat{\varepsilon}_{D_n}(h)-\varepsilon(h)\right|\geq\epsilon\right)\leq 2|\mathcal{H}|\exp(-2n\epsilon^2)\quad(3)\end{aligned}$$

使用**Union bound**，得到

$$\begin{aligned}&\text{Let}\quad\delta=\sum_{h\in\mathcal{H}}P\left(\left|\hat{\varepsilon}_{D_n}(h)-\varepsilon(h)\right|\geq\epsilon\right)\\&\text{Then}\quad\delta\leq 2|\mathcal{H}|\exp(-2n\epsilon^2)\\&\epsilon\leq\sqrt{\frac{\log|\mathcal{H}|+\log(\frac{2}{\delta})}{2n}}\end{aligned}$$

总结一下，有限假设空间说了一件什么事呢：对于一个有限的假设空间$\mathcal{H}=\{h_1,h_2,\cdots,h_n\}$，则我们总是可以以$1-\delta$的概率保证，对于任何一个假设空间中的假设$h\in\mathcal{H}$,期望误差被经验误差的一个上界控制住。形式化：

- *Let $\mathcal{H}$ be a finite hypothesis space, $\mathcal{H}<\infty$, then for any $\delta>0$, with probability at least $1-\delta$*

$$\forall h\in\mathcal{H},\ \varepsilon(h)\leq\hat{\varepsilon}_{D_n}(h)+\sqrt{\frac{\log|\mathcal{H}|+\log\frac{2}{\delta}}{2n}}$$

- **remark**：当样本数 n 增多后，模型效果会变好：右侧第二项减小，经验误差与期望误差之间的差距减小）。模型容量的期望误差曲线是 *U* 形：当假设空间 $\mathcal{H}$ 增大时，尽管模型的拟合能力更强，$\hat{\varepsilon}_{D_n}(h)$ 更小，$\sqrt{\frac{\log|\mathcal{H}|+\log\frac{2}{\delta}}{2n}}$ 却更大了，因此期望误差先减后增，此时发生的是过拟合。

这里填一个坑：为何期望误差与经验误差之间的差距的上界反映了模型的泛化能力：希望在自己有限的数据集上训练得到的模型，能够顺利得到应用，即便是面对它未曾接触过的输入，也可以给出正确合理的答案，这就是泛化。

对于神经网络构成的假设函数族，可以使用量化的trick：计算机是有编码位的，有限的存储空间能够表示的状态数也一定是有限的。

4.3 有限假设空间是PAC-可学习的

$$
\begin{gathered}
\text{proof:}\\
\mathcal{E}(h_{\mathcal{D}_n}) - \mathcal{E}(h^*) = \mathcal{E}(h_{\mathcal{D}_n}) - \hat{\mathcal{E}}_{\mathcal{D}_n}(h_{\mathcal{D}_n}) + \hat{\mathcal{E}}_{\mathcal{D}_n}(h_{\mathcal{D}_n}) - \mathcal{E}(h^*)\\
\le \mathcal{E}(h_{\mathcal{D}_n}) - \hat{\mathcal{E}}_{\mathcal{D}_n}(h_{\mathcal{D}_n}) + \hat{\mathcal{E}}_{\mathcal{D}_n}(h^*) - \mathcal{E}(h^*)\\
\le \left|\mathcal{E}(h_{\mathcal{D}_n}) - \hat{\mathcal{E}}_{\mathcal{D}_n}(h_{\mathcal{D}_n})\right| + \left|\hat{\mathcal{E}}_{\mathcal{D}_n}(h^*) - \mathcal{E}(h^*)\right| \quad \le 2\sup_{h\in\mathcal{H}}\left|\hat{\mathcal{E}}_{\mathcal{D}_n}(h) - \mathcal{E}(h)\right|\\
P(\mathcal{E}(h_{\mathcal{D}_n}) - \mathcal{E}(h^*) \ge \epsilon) \le P(\sup_{h\in\mathcal{H}}\left|\hat{\mathcal{E}}_{\mathcal{D}_n}(h) - \mathcal{E}(h)\right| \ge \frac{\epsilon}{2})\\
= P(\exists h\in\mathcal{H}, \left|\hat{\mathcal{E}}_{\mathcal{D}_n}(h) - \mathcal{E}(h)\right| \ge \frac{\epsilon}{2}) = 2|\mathcal{H}|\exp(\frac{-n\epsilon^2}{2}) = \delta
\end{gathered}
$$

5 无限假设空间泛化误差界

无限假设空间，指$|\mathcal{H}| \to +\infty$的情况，即假设空间中存在无数个假设。在日常生活中，我们使用的大部分机器学习模型，假设空间基本都是无穷的。如何度量一个无限的假设空间呢？接下来介绍的三种方法通过模型拟合数据的能力，间接刻画假设空间的复杂性。可以直观理解可以是模型拟合数据的能力越强，它所对应的假设空间就越复杂。

5.1 Rademacher Complexity

- 考虑一个给定的数据集 S，它共有 n 个样本

$$S = \big((x_1, y_1), (x_2, y_2) \dots (x_n, y_n)\big) \quad where \quad y_i = \{-1, +1\}$$

利用模型集 h 对其进行划分,即

$$h(x) : S \to \{-1, +1\}$$

使用01损失函数，则经验误差为:

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{n}\Sigma_{i=1}^n \mathbf{1}[h(x_i) \ne y_i] &= \frac{1}{n}\Sigma_{i=1}^n \frac{1 - y_i h(x_i)}{2}\\
&= \frac{1}{2} - \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^n y_i h(x_i)
\end{aligned}
$$

因此可以定义预测结果和真实结果之间的相关性 $\text{correlation} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n y_i h(x_i) \in [0,1]$,这个值越大，则表明模型的分类效果越好，因此我们的目标就是找到

$$h^* = \sup_{h\in\mathcal{H}} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n y_i h(x_i)$$

为了导出*Rademacher*复杂度的表达形式，我们需要知道对分（**dichotomy**）和打散（**shatters**）的概念。对分可以理解为把样本集合中的每一个点都打上标签，n个点就有2^n个对分的方式，而一个假设空间可以把n个点打散则意味着，假设空间有足够多的假设来区分这2^n种对分的方式。那么，不难理解可以用下面的式子定义拉达马赫复杂度。

$$\frac{1}{2n}\sum_y \sup \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n y_i h(\mathbf{x_i})\text{或者写为}\mathbb{E}_y \sup_{h\in\mathcal{H}} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n y_i h(\mathbf{x_i})$$

样本的标签y_i习惯于写成σ_i,是一个取值$\in\{1,-1\}$伯努利变量于是有：

- 经验**Rademacher**复杂度的定义

$$\hat{R}_{\mathcal{S}_n}(g) = \mathbb{E}_\sigma\left[\sup_{g\in G}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \sigma_i g(\mathbf{z}_i)\right]$$

- 期望**Rademacher**复杂度的定义

$$\hat{R}_{\mathcal{S}_n}(\mathcal{G}) = \mathbb{E}_{\sigma\sim\{-1,1\}^n}\left[\sup_{g\in G}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \sigma_i g(z_i)\right]$$

> Theorem: 期望**Rademacher**复杂度关于n是不增的函数

proof:

我们需要证明 $R_{n+1}(\mathcal{G}) = \mathbb{E}_{D_{n+1}}\left\{\mathbb{E}_\sigma\left[\sup_{g\in G}\frac{1}{n+1}\sum_{i=1}^{n+1}\sigma_i g(z_i)\right]\right\} \le R_n(\mathcal{G})$.根据定义有:

$$R_{n+1}(\mathcal{G}) = \mathbb{E}_{D_{n+1}}\left\{\mathbb{E}_\sigma\left[\sup_{g\in G}\frac{1}{n+1}\sum_{i=1}^{n+1}\sigma_i g(z_i)\right]\right\}$$

通过**重采样**技术（思想是本来采n个样本求期望，现在是采n*（n+1）个样本）

$$=\frac{1}{n+1}E_{D^{n+1}}\{E_\sigma[\sup\sum_{k=1}^{n+1}(\frac{1}{n}\sum_{i\neq k}\sigma_i g(z_i))]\}$$

3. 由于 $\sup$ 满足$\sup(A+B)\leq\sup A+\sup B$ 的性质，我们可以得到：

$$\leq\frac{1}{n+1}\sum_{k=1}^{n+1}\mathbb{E}_{D^{n+1}}\left\{\mathbb{E}_\sigma\left[\sup_{g\in\mathcal{G}}\frac{1}{n}\sum_{i\neq k}\sigma_i g(\mathbf{z}i)\right]\right\}=\mathcal{R}_n(\mathcal{G})$$

- 基于 Rademacher复杂度的泛化误差界

> Theorem:

Let $\mathfrak{g}$ be a family of general functions mapping from Z to $[0,1]$. Then, for any $\delta>0$, with probability at least $1-\delta$, the following bound holds for all $g\in\mathfrak{g}$

$$\mathbb{E}_{z\sim D}\big[g(z)\big]\leq\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}g(z_i)+2\mathcal{R}_n(g)+\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{2n}}$$

$$\mathbb{E}_{z\sim D}\big[g(z)\big]\leq\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}g(z_i)+2\hat{\mathcal{R}}_n(g)+3\sqrt{\frac{\log(2\delta)}{2n}}$$

proof:

$$Let\quad\Phi(\mathcal{S})=\sup_{g\in\mathfrak{g}}(\mathbb{E}_D[g]-\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}}[g])\quad where\quad\mathcal{S}=(z_1,z_2,\ldots,z_n)$$

回忆 $McDiarmid$ 不等式

若 $x_1,x_2,\ldots,x_m$ 为 m 个独立随机变量，且对任意 $1\leq i\leq m$，函数 f 满足

$$\sup_{x_1,\ldots,x_m,x_i'}|f(x_1,\ldots,x_m)-f(x_1,\ldots,x_{i-1},x_i',x_{i+1},\ldots,x_m)|\leq c_i$$

则对任意 $\epsilon>0$ 有

$$P\big(f(x_1,\ldots,x_m)-\mathbb{E}(f(x_1,\ldots,x_m))\geq\epsilon\big)\leq\exp(\frac{-2\epsilon^2}{\sum_{i=1}c_i^2})$$

$$P\big(\big|f(x_1,\ldots,x_m)-\mathbb{E}(f(x_1,\ldots,x_m))\big|\geq\epsilon\big)\leq 2\exp(\frac{-2\epsilon^2}{\sum_{i=1}c_i^2})$$

可见，要应用 $McDiarmid$ 不等式，应先要满足其条件。于是引入 $\mathcal{S}'$， $\mathcal{S}'$ 与 $\mathcal{S}$ 只有一个变量的取值不同

Change $\mathcal{S}$ to $\mathcal{S}'=\{z_1,\ldots,z_i',..,z_n\}$ that differs only at $z_i'\neq z_i$

$$\Phi(\mathcal{S})-\Phi(\mathcal{S}')=\sup_{g\in\mathfrak{g}}(\mathbb{E}_D[g]-\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}}[g])-\sup_{g\in\mathfrak{g}}(\mathbb{E}_D[g]-\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}'}[g])\quad(1)$$

$$\leq\sup_{g\in\mathfrak{g}}\{(\mathbb{E}_D[g]-\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}}[g])-(\mathbb{E}_D[g]-\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}'}[g])\}\quad(2)$$

$$=\sup_{g\in\mathfrak{g}}\{\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}'}[g]-\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}}[g]\}=\sup_{g\in\mathfrak{g}}\{\frac{1}{n}\sum_{z\in\mathcal{S}'}g(z)-\frac{1}{n}\sum_{z\in\mathcal{S}}g(z)\}\quad(3)$$

$$=\frac{1}{n}\sup_{g\in\mathfrak{g}}\{g(z_i')-g(z_i)\}\leq\frac{1}{n}\quad(4)$$

(2) 式是在 (1) 的基础上，通过 $\sup$ 的性质得到的，形式很类似于三角不等式。由于 $\mathcal{S}'$ 与 $\mathcal{S}$ 只有一个变量的取值不同（$z_i'\neq z_i$），且 $g(z_i)\leq 1$，所以 $(3)\rightarrow(4)$。至此，使用 $McDiarmid$ 不等式的条件已经满足，取 $c_i=\frac{1}{n}$

$$P\Big(\Phi(\mathcal{S})-\mathbb{E}_{\mathcal{S}}\Phi(\mathcal{S})\geq\epsilon\Big)\leq\exp\Big(-\frac{2\epsilon^2}{\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{n^2}}\Big)=\exp(-2n\epsilon^2)$$

令 $\delta=P\Big(\Phi(\mathcal{S})-\mathbb{E}_{\mathcal{S}}\Phi(\mathcal{S})\geq\epsilon\Big)$，则有 $\delta\leq\exp(-2n\epsilon^2)$，解出 ϵ，

则 *With probability at least* $1-\frac{\delta}{2}$： $\Phi(\mathcal{S})\leq\mathbb{E}_{\mathcal{S}}[\Phi(\mathcal{S})]+\sqrt{\frac{\log(2/\delta)}{2n}}\quad(*)$

在 $(*)$ 的基础上，我们进一步求 $E_{\mathcal{S}}[\Phi(\mathcal{S})]$ 的上界

$$
\begin{aligned}
E_{\mathcal{S}}[\Phi(\mathcal{S})] &= \mathbb{E}_{\mathcal{S}}\Big[\sup_{g\in\mathfrak{g}}\big(\mathbb{E}_D[g]-\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}}[g]\big)\Big] \\
&= \mathbb{E}_{\mathcal{S}}\Big[\sup_{g\in\mathfrak{g}}\big(\mathbb{E}_{\mathcal{S}'}\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}'}[g]-\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}}[g]\big)\Big] \quad (2) \\
&= \mathbb{E}_{\mathcal{S}}\Big[\sup_{g\in\mathfrak{g}}\mathbb{E}_{\mathcal{S}'}\big(\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}'}[g]-\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}}[g]\big)\Big] \quad (3) \\
&\le \mathbb{E}_{\mathcal{S},\mathcal{S}'}\Big[\sup_{g\in\mathfrak{g}}\big(\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}'}[g]-\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}}[g]\big)\Big] \quad (4) \\
&= \mathbb{E}_{\mathcal{S},\mathcal{S}'}\Big[\sup_{g\in\mathfrak{g}}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\big(g(z_i')-g(z_i)\big)\Big] \quad (5) \\
&= \mathbb{E}_{\mathcal{S},\mathcal{S}'}\Big[\sup_{g\in\mathfrak{g}}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sigma_i\big(g(z_i')-g(z_i)\big)\Big] \quad (6) \\
&\le \mathbb{E}_{\sigma,\mathcal{S}'}\Big[\sup_{g\in\mathfrak{g}}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sigma_i g(z_i')\Big]+\mathbb{E}_{\sigma,\mathcal{S}}\Big[\sup_{g\in\mathfrak{g}}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sigma_i g(z_i)\Big] \quad (7) \\
&= 2\mathbb{E}_{\sigma,\mathcal{S}}\Big[\sup_{g\in\mathfrak{g}}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sigma_i g(z_i)\Big] = 2\mathcal{R}_n(\mathfrak{g}) \quad (**)
\end{aligned}
$$

(2) 采用了重采样，有如下关系成立：$\mathbb{E}_D[g]=\mathbb{E}_{\mathcal{S}'\sim D^n}\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}'}[g]$

(3) 由于 $\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}}[g]$ 与 $\mathcal{S}'$ 无关，所以 $\mathbb{E}_{\mathcal{S}'}\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}}[g]=\hat{\mathbb{E}}_{\mathcal{S}}[g]$，因此可以将 $\mathbb{E}_{\mathcal{S}'}$ 提出来

(4) 在 (3) 的基础上使用 $Jensen$ 不等式

(5) 在 (4) 的基础上对期望进行展开

(6) 式引入 $Rademacher\quad variable$，当 $\sigma_i=1$ 时，(6) 和 (5) 的形式一致；当 $\sigma_i=-1$ 时，由于我们是对 $\mathcal{S},\mathcal{S}'$ 同时求期望，此时只需交换 z_i 和 z_i' 的取值即可

(7) 应用 sup 的三角不等式 $\sup(A+B)\le\sup A+\sup B$

如此，整合 $(*)$ 和 $(**)$，得到结论：With probability at least $1-\delta$

$$
\mathbb{E}_{z\sim D}\big[g(z)\big]\le\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}g(z_i)+2\mathcal{R}_n(g)+\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{2n}}
$$

基于此，我们得到了由期望Rademacher复杂度控制的泛化误差的上界形式（我们只需要将G定义为假设空间到损失函数的派生函数族）。然而，我们其实希望得到的是由经验Rademacher复杂度给出的一个限制，这个是我们在训练集上进行训练能直接保证的。接下来，我们先导出期望Rademacher复杂度对经验Rademacher复杂度的上界控制。

设 $S=\{z_1,z_2,\ldots,z_n\}$

$$
\hat{R}(\mathcal{G})=\mathbb{E}\left[\sup_{g\in G}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sigma_i g(z_i)\right]
$$

$$
|\hat{R}_{S'}-\hat{R}_S|\le|\frac{1}{n}\mathbb{E}_\sigma[\sup_{g\in\mathcal{G}}\{\sigma_i g(z_i)-\sigma_i' g(z_i')\}]|\le\frac{1}{n}
$$

由 McDiarmid 理论可得：

$$
\Pr\{R_n(G)\le\hat{R}(G)+\sqrt{\frac{\log(2/\delta)}{2n}}\}\ge 1-\delta/2
$$

而我们已经推导得到了

$$
\Pr\{\mathbb{E}_{z\sim D}\big[g(z)\big]\le\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}g(z_i)+2\mathcal{R}_n(g)+\sqrt{\frac{\log(2/\delta)}{2n}}\}\ge 1-\frac{1}{2}\delta
$$

再利用**Union bound**(2)

$$
\Pr\{\mathbb{E}_{z\sim D}[g(z)]\le\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}g(z_i)+3\hat{R}_n(g)+2\sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{2n}}\}\ge 1-\delta
$$

在之前的推导中$g(z)\in\mathcal{G}$是一个一般的函数族。为了获得关于误差的界，我们需要将定义$\mathcal{G}$是$\mathcal{H}$的0-1loss函数族，即：

$$
\mathcal{G}=\{(x,y)\to\mathbf{1}[h(\mathbf{x})\ne y]|h(\mathbf{x})\in\mathcal{H}\}
$$

> Theorem:

$$\begin{aligned}\text{proof: } R_n(g) &= E_{S,\sigma} \sup_{h\in\mathcal{H}} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \sigma_i \mathbf{1}_{[h(x_i)\neq y_i]} \\ &= E_{S,\sigma} \sup_{h\in\mathcal{H}} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \sigma_i \frac{1}{2}(1-y_i h(x_i)) \\ &= \frac{1}{2} E_{S,\sigma} \sup_{h\in\mathcal{H}} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(-\sigma_i y_i)(h(x_i)) = \frac{1}{2}R_n(\mathcal{H})\end{aligned}$$

上式子中最后一个等号利用了变量替换，$(-\sigma_i y_i)\to\sigma_i$

从而我们得到了以假设空间的Rademacher复杂度上界控制的误差泛化界。

> Theorem:

Let $\mathcal{H}$ be a family of binary classifiers taking values in $\{-1,+1\}$. Then, for any $\delta>0$, with probability at least $1-\delta$, the generalization bound holds for all $h\in\mathcal{H}$:

$$\varepsilon_D(h) \le \hat{\varepsilon}_{D_n}(h) + \mathcal{R}_n(\mathcal{H}) + \sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{2n}}$$
$$\varepsilon_D(h) \le \hat{\varepsilon}_{D_n}(h) + \hat{\mathcal{R}}_n(\mathcal{H}) + 3\sqrt{\frac{\log(2/\delta)}{2n}}$$

然而，根据Rademacher复杂度的定义式，计算复杂度是$\mathcal{O}(2^n)$。我们还是希望找到一个更松但是可求解的上界代替之。接下来的这个引理就是完成了这样的一件事：找到了Rademacher复杂度的一个上界。

> Theorem: (Massart's Lemma)

Let $\mathcal{A}\subseteq\mathbb{R}^n$ be a finite set with $R=\max_{x\in\mathcal{A}}\|x\|_2$, then the following holds:

$$\mathbb{E}_\sigma\left[\frac{1}{n}\sup_{x\in\mathcal{A}}\sum_{i=1}^{n}\sigma_i x_i\right] \le \frac{R\sqrt{2\log|\mathcal{A}|}}{n}$$

proof:

$$\begin{aligned}\exp\left(t\mathbb{E}_\sigma\left[\sup_{x\in\mathcal{A}}\sum_{i=1}^{n}\sigma_i x_i\right]\right) &\le \mathbb{E}_\sigma\left(\exp\left[\sup_{x\in\mathcal{A}}\sum_{i=1}^{n}\sigma_i x_i\right]\right) \\ &= \mathbb{E}_\sigma\left(\sup_{x\in\mathcal{A}}\exp\left[t\sum_{i=1}^{n}\sigma_i x_i\right]\right) \\ &\le \sum_{x\in\mathcal{A}}\mathbb{E}_\sigma\left(\exp\left[t\sum_{i=1}^{n}\sigma_i x_i\right]\right) = \sum_{x\in\mathcal{A}}\prod_{i=1}^{n}\mathbb{E}_\sigma\left(\exp\left[t\sigma_i x_i\right]\right) \\ &\le \sum_{x\in\mathcal{A}}\exp\left(\frac{\sum_{i=1}^{n}t^2(2|x_i|)^2}{8}\right) \le |\mathcal{A}|e^{\frac{t^2R^2}{2}}\end{aligned}$$

$$\mathbb{E}_\sigma\left[\sup_{x\in\mathcal{A}}\sum_{i=1}^{n}\sigma_i x_i\right] \le \frac{\ln|\mathcal{A}|}{t} + \frac{tR^2}{2} = f(t) \le f(t_0 = \frac{\sqrt{2\ln|\mathcal{A}|}}{\mathcal{R}}) = \mathcal{R}\sqrt{2\ln|\mathcal{A}|}$$

综上我们得到了Rademacher复杂度的一个上界，但这里还是不够直观，怎么度量R和A呢？我们有接下来的增长函数的概念。

5.2 Growth Function

除了Rademacher复杂度，还有没有办法度量一个假设空间的复杂度？下面介绍增长函数的概念。

> Growth Function:

$$\forall n\in\mathbb{N}, \Pi_{\mathcal{H}}(n) = \max_{\{x_1,\ldots,x_n\}\subseteq X}|\{h(x_1),\ldots,h(x_n):h\in\mathcal{H}\}|$$

说人话，增长函数刻画的是The maximum number of ways n points can be classified using $\mathcal{H}$.。实际上，增长函数可以为Rademacher复杂度提供一个松弛的上界。

> Theorem:

$$\mathcal{R}_n(\mathcal{G}) \le \sqrt{\frac{2\log\Pi_{\mathcal{G}}(n)}{n}}$$

proof:

$$\mathcal{R}_n(\mathcal{G}) = \mathbb{E}_{S_n}\mathbb{E}_\sigma\left[\sup_{g\in\mathcal{G}}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sigma_i g(z_i)\right]$$
$$\le \mathbb{E}_{S_n}\frac{\sqrt{n}\sqrt{2\ln|g(z_1),\cdots,g(z_n):g\in\mathcal{G}|}}{n} \le \mathbb{E}_{S_n}\frac{\sqrt{2\log\Pi_{\mathcal{G}}(n)}}{n} = \sqrt{\frac{2\log\Pi_{\mathcal{G}}(n)}{n}}$$

证明中的第一个小于等于号运用了Massart's Lemma，将其中的x用g(x)做带换。那么我们得到由增长函数给出的泛化误差上界。

$$\Pr\{\varepsilon_D(h) \le \hat{\varepsilon}_D(h) + \sqrt{\frac{2\log \Pi_{\mathcal{H}}(n)}{n}} + \sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{2n}}\} \ge 1-\delta$$

可以看到，我们获得的上界越来越直观，但是也更加松弛了（x）。还是不够直观，于是又有VC-dimension的概念。接下来介绍VC维。

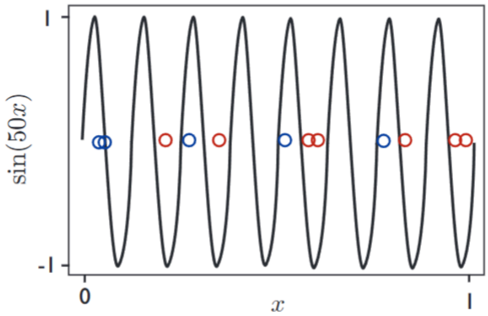
5.3 VC维

$$\mathrm{VCD}(\mathcal{H}) = \max\{n : \Pi_{\mathcal{H}}(n) = 2^n\}$$

直观理解：VC-dimension is essentially the size of the largest set that can be fully shattered by $\mathscr{H}$。也就是说，给定一个VCD为n的机器学习模型，可以构建一个n大小的sample size，该模型可以将其打散，而n+1则不行。似乎VC维给出了对模型复杂度的一个很好的刻画，然而对部分模型并非如此。如下正弦函数按照定义，VCD为无穷，但很明显这并不是一个有效的估计。

- Consider sine function hypothesis space $\mathcal{H}$ from $\mathbb{R}$ to $\mathbb{R}$:

$$\forall w \in \mathbb{R}, \qquad h_w(x) = \begin{cases} +1, & \sin(wx) \ge 0 \\ -1, & \sin(wx) < 0 \end{cases}$$



- It can be proved that the set $\{2^{-i} | i \le n \in \mathbb{N}^+\}$ can be shattered.

本笔记最后给出一个利用VCD来估计泛化误差界的引理（Sauer's Lemma）

Let $\mathcal{H}$ be a hypothesis class, i.e. a class of functions from $\Omega \to \{0,1\}$. Each hypothesis can be thought of as a subset of Ω. For any finite $S \subseteq \Omega$, let $\Pi_{\mathcal{H}}(S) = \{h \cap S : h \in \mathcal{H}\}$. We call $\Pi_{\mathcal{H}}(S)$ the *projection* of $\mathcal{H}$ on S. Equivalently, suppose $S = \{x_1, \dots, x_m\}$, let

$$\Pi_{\mathcal{H}}(S) = \{[h(x_1), \dots, h(x_m)] \mid h \in \mathcal{H}\}$$

and call $\Pi_{\mathcal{H}}(S)$ the set of all *dichotomies* (or *behaviors*) on S *realized by* (or *induced by*) $\mathcal{H}$. A set S is *shattered* by $\mathcal{H}$ if $|\Pi_{\mathcal{H}}(S)| = 2^{|S|}$. Note that, if S is shattered then every subset of S is shattered.

Definition 0.1 (VC-dimension)**.** The *VC-dimension* of $\mathcal{H}$ is defined to be

$$\text{VCD}(\mathcal{H}) = \max\{|S| : S \text{ shattered by } \mathcal{H}\}.$$

The following lemma was first proved by Vapnik-Chervonenkis [5], and rediscovered many times (Sauer [3], Shelah [4]), among others. It is often called the Sauer lemma or Sauer-Shelah lemma in the literature. (Sauer said that Paul Erdös posed the problem.)

Lemma 0.2 (Sauer lemma)**.** *Suppose* $\text{VCD}(\mathcal{H}) = d < \infty$. *Define*

$$\Pi_{\mathcal{H}}(m) = \max\{|\Pi_{\mathcal{H}}(S)| : S \subseteq \Omega, |S| = m\}$$

(i.e., $\Pi_{\mathcal{H}}(m)$ is the maximum size of a projection of $\mathcal{H}$ on an m-subset of Ω.) Then,

$$\Pi_{\mathcal{H}}(m) \le \Phi_d(m) := \sum_{i=0}^{d} \binom{m}{d} \le \left(\frac{em}{d}\right)^d = O(m^d)$$

(Note that, if $\text{VCD}(\mathcal{H}) = \infty$, then $\Pi_{\mathcal{H}}(m) = 2^m, \forall m$)

Proof #1: The inductive proof (not nice!) We induct on $m + d$. For $h \in \mathcal{H}$, define $h_S = h \cap S$. The $m = 0$ and $d = 0$ cases are trivial. Now consider $m > 0, d > 0$. Fix an arbitrary element $s \in S$. Define

$$\mathcal{H}' = \{h_S \in \Pi_{\mathcal{H}}(S) \mid s \notin h_S,\ h_S \cup \{s\} \in \Pi_{\mathcal{H}}(S)\}$$

Then,

$$|\Pi_{\mathcal{H}}(S)| = |\Pi_{\mathcal{H}}(S - \{s\})| + |\mathcal{H}'| = |\Pi_{\mathcal{H}}(S - \{s\})| + |\Pi_{\mathcal{H}'}(S)|$$

Since $\text{VCD}(\mathcal{H}') \le d - 1$, by induction we obtain

$$|\Pi_{\mathcal{H}}(S)| \le \Phi_d(m-1) + \Phi_{d-1}(m) = \Phi_d(m).$$

□

非常有趣并且难以理解的是集合H'的构造方式。

$$\Pi_{\mathcal{H}}(n) \le \left(\frac{en}{d}\right)^d = O(n^d)$$

proof:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^{d} \binom{n}{i} &\le \sum_{i=0}^{d} \binom{n}{i} \binom{n}{d}^{d-i} \le \sum_{i=0}^{n} \binom{n}{i} \binom{n}{\frac{n}{d}}^{d-i} \\
&= \left(\frac{n}{d}\right)^d \sum_{i=0}^{n} \binom{n}{i} \binom{d}{\frac{n}{n}}^{i} = \left(\frac{n}{d}\right)^d \left(1 + \frac{d}{n}\right)^n \\
&\le \left(\frac{n}{d}\right)^d e^d
\end{aligned}$$

最后，我们就得到了 著名的VCD-bound（这里直接放 软院@龙明盛 老师的PPT）咕咕咕

VC-Dimension Bound

Vladimir Vapnik

Statistical learning theory

- Let $\mathcal{H}$ be a hypothesis set with $\mathbf{VCdim}(\mathcal{H}) = d$
  - If $d = \infty$, $\Pi_{\mathcal{H}}(n) \le 2^n$.
  - If $d < \infty$, $\Pi_{\mathcal{H}}(n) \le \left(\frac{en}{d}\right)^d = O(n^d)$.

$d < \infty$ is PAC learnable!

- Theorem: Let $\mathcal{H}$ be a family of functions taking values in $\{-1, +1\}$ with VC-dimension d, then for any $\delta > 0$, with probability at least $1 - \delta$, for all $h \in \mathcal{H}$:

$$\mathcal{E}_D(h) \le \hat{\mathcal{E}}_{\mathcal{D}_n}(h) + \sqrt{\frac{2d \log\frac{en}{d}}{n}} + \sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{2n}}$$

- The general form: $\mathcal{E}_D(h) \le \hat{\mathcal{E}}_{\mathcal{D}_n}(h) + O\left(\sqrt{\frac{\log(n/d)}{(n/d)}}\right)$.

Reference

- Mingsheng Long. Machine Learning, slides
- 光火, victor_b_zhang@163.com, 软院互助文档/课程笔记/机器学习/计算学习理论(1)(2)
- https://cse.buffalo.edu/~hungngo/classes/2010/711/lectures/sauer.pdf