Complessità dello Spazio delle Ipotesi

Richiamo

Supervised Learning
(apprendimento supervisionato)

$\{(x_i, f(x_i)\}$

- dato un insieme di dati preclassificati (esempi di apprendimento) apprendere una descrizione generale che incapsula l'informazione contenuta negli esempi

- tale descrizione deve poter essere usata in modo predittivo — dato un nuovo ingresso $\tilde{x}$, predire $f(\tilde{x})$

- si assume che un esperto (o maestro) ci fornisca la supervisione — i valori $f(x_i)$

Dati

Consideriamo il paradigma di Apprendimento Supervisonato

Dati a nostra disposizione (off-line)

$$\text{Dati} = \{(x^{(1)}, f(x^{(1)})), \ldots, (x^{(N)}, f(x^{(N)}))\}$$

Suddivisione tipica ($N = N_{tr} + N_{ts}$) :

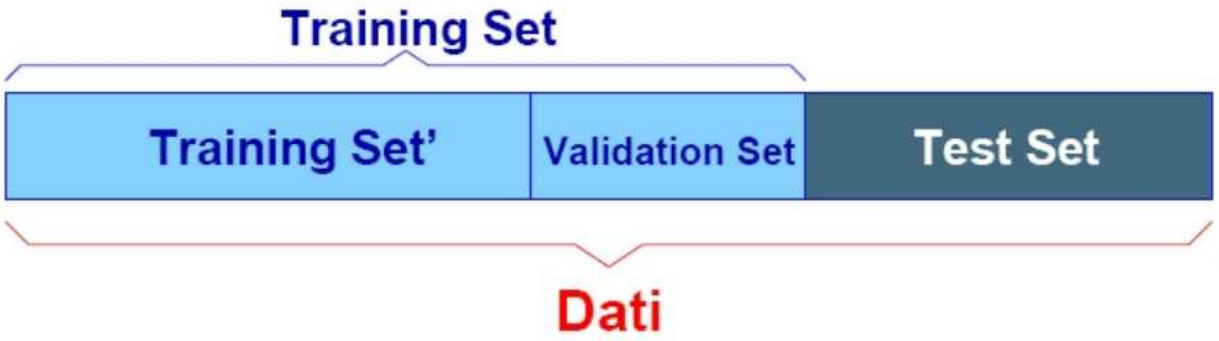
- $\text{Training Set} = \{(x^{(1)}, f(x^{(1)})), \ldots, (x^{(N_{tr})}, f(x^{(N_{tr})}))\}$
  usato direttamente dall'algoritmo di apprendimento;
- $\text{Test Set} = \{(x^{(1)}, f(x^{(1)})), \ldots, (x^{(N_{ts})}, f(x^{(N_{ts})}))\}$
  usato alla fine dell'apprendimento per stimare la bontà della soluzione.

Dati (cont.)

Se N abbastanza grande il Training Set è ulteriormente suddiviso in due sottoinsiemi $(N_{tr} = N_{\widehat{tr}} + N_{val})$:

- Training Set' $= \{(x^{(1)}, f(x^{(1)})), \ldots, (x^{(N_{\widehat{tr}})}, f(x^{(N_{\widehat{tr}})}))\}$
  usato direttamente dall'algoritmo di apprendimento;
- Validation Set $= \{(x^{(1)}, f(x^{(1)})), \ldots, (x^{(N_{val})}, f(x^{(N_{val})}))\}$
  usato indirettamente dall'algoritmo di apprendimento.

Il Validation Set serve per scegliere l'ipotesi $h \in \mathcal{H}$ migliore fra quelle consistenti con il Training Set'



evitare l'overfitting!

Soluzione

utilizzare uno spazio delle ipotesi che non sia

- né troppo semplice (underfitting)
- né troppo complesso (overfitting)

Occorre "misurare" la complessita dello spazio delle ipotesi

Soluzione

utilizzare uno spazio delle ipotesi che non sia

- né troppo semplice (underfitting)
- né troppo complesso (overfitting)

Occorre "misurare" la complessità dello spazio delle ipotesi

VC-dimension

Definizione: Frammentazione (Shattering)

Dato $S \subset X$, S è frammentato (shattered) dallo spazio delle ipotesi $\mathcal{H}$ se e solo se

$$\forall S' \subseteq S,\ \exists h \in \mathcal{H},\ \text{tale che}\ \forall x \in S,\ h(x) = 1 \Leftrightarrow x \in S'$$

($\mathcal{H}$ realizza tutte le possibili dicotomie di S)

Definizione: VC-dimension

La VC-dimension di uno spazio delle ipotesi $\mathcal{H}$ defi nito su uno spazio delle istanze X è data dalla cardinalità del sottoinsieme più grande di X che è frammentato da $\mathcal{H}$:

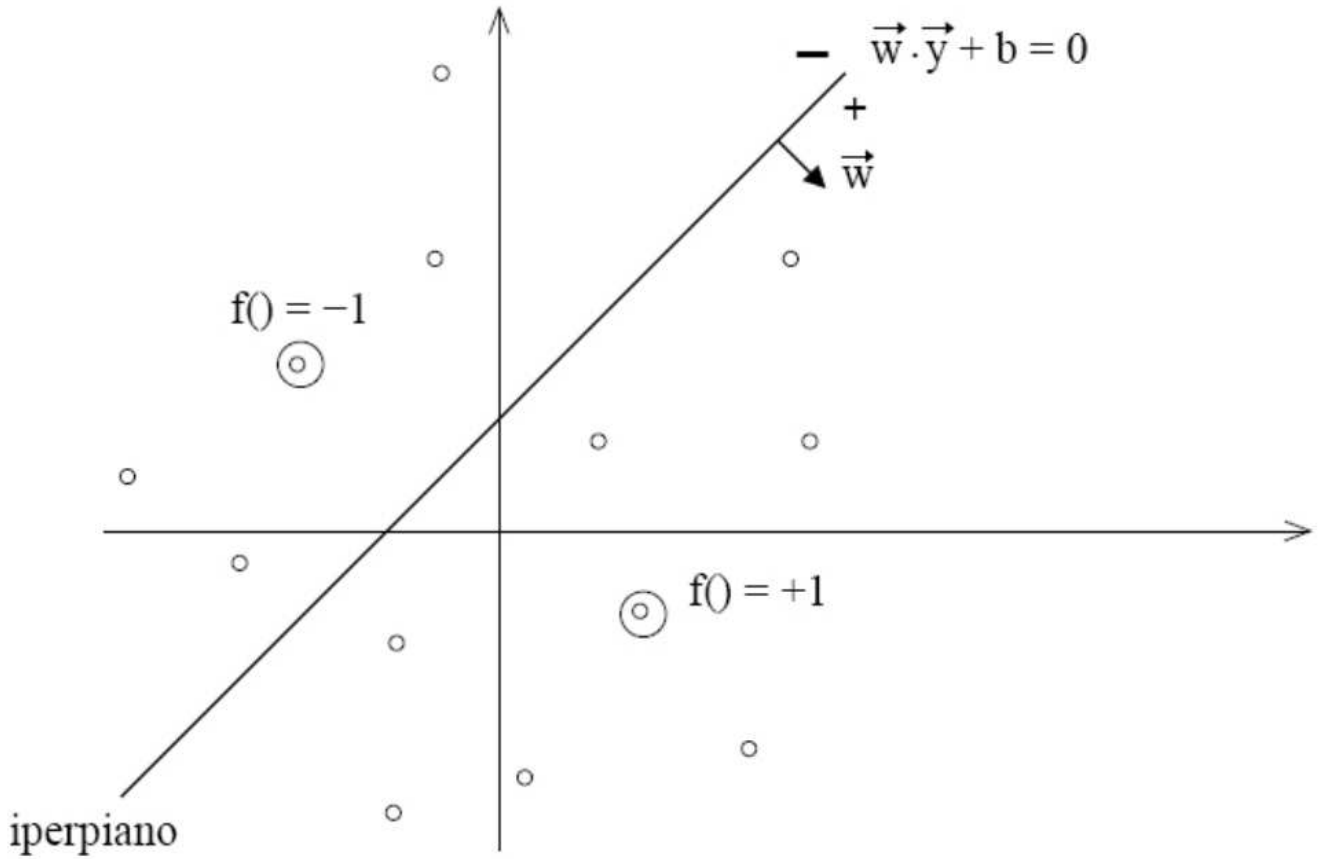
$$VC(\mathcal{H}) = \max_{S \subseteq X} |S| :\ \mathcal{H}\ \text{frammenta}\ S$$

$VC(\mathcal{H}) = \infty$ se S non è limitato

VC-dimension: Esempio

Quale è la VC-dimension di $\mathcal{H}_1$?

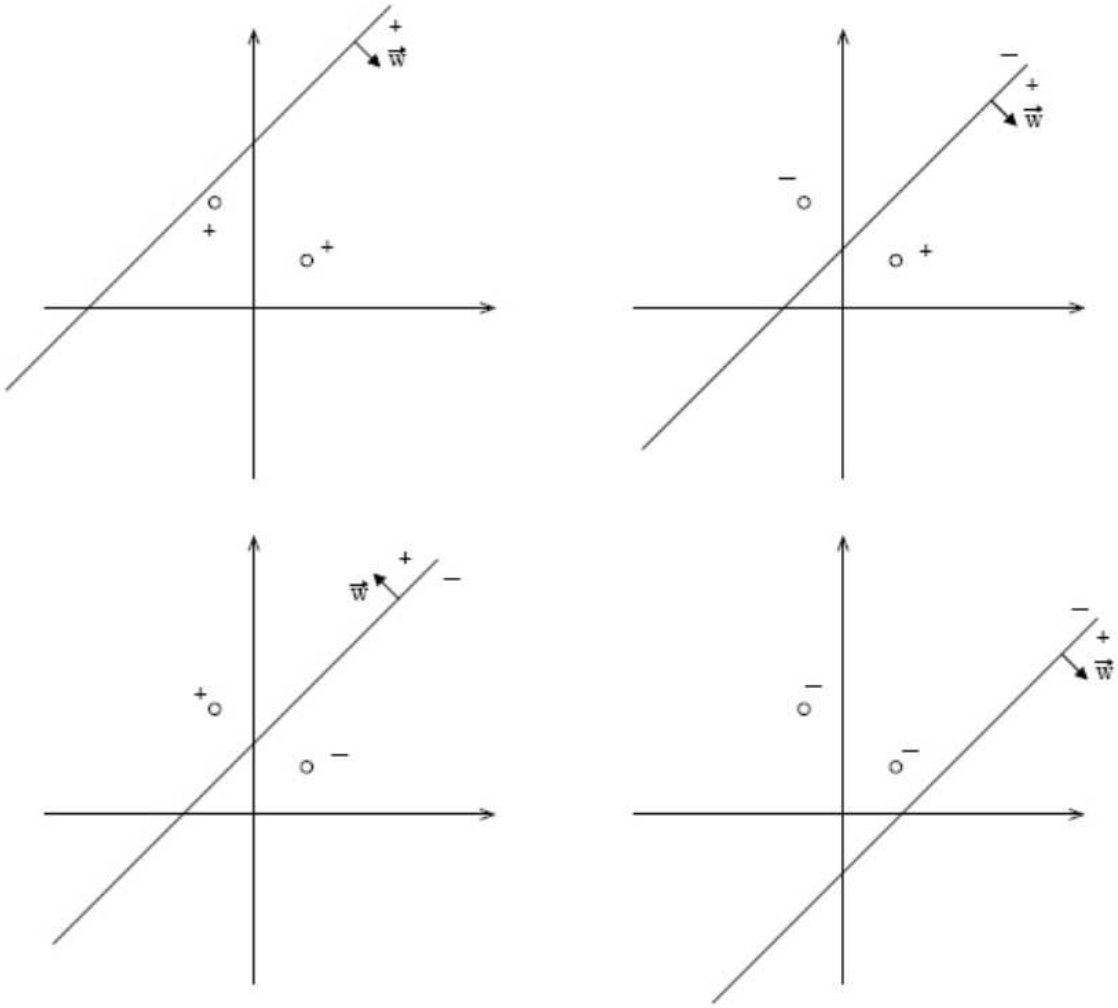
$$\mathcal{H}_1 = \{f_{(\vec{w},b)}(\vec{y}) | f_{(\vec{w},b)}(\vec{y}) = sign(\vec{w} \cdot \vec{y} + b), \vec{w} \in \mathbb{R}^2, b \in \mathbb{R}\}$$



VC-dimension: Esempio

Quale è la VC-dimension di $\mathcal{H}_1$?

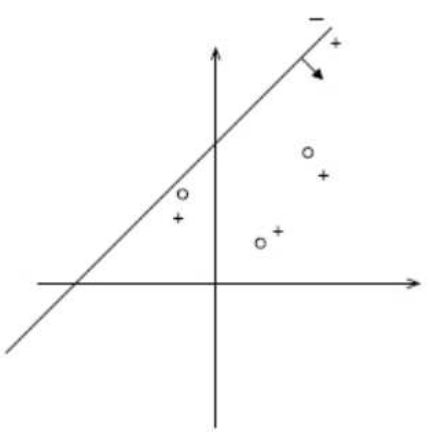
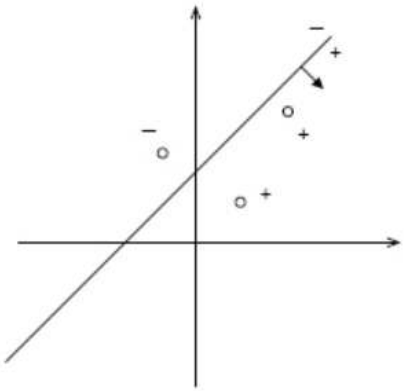
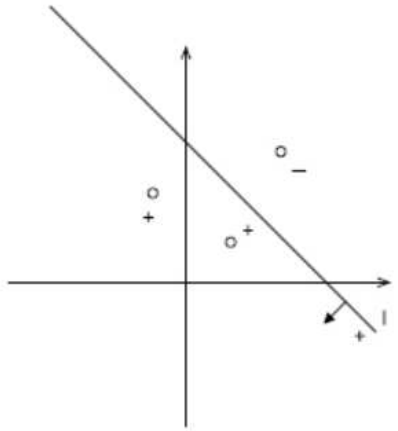
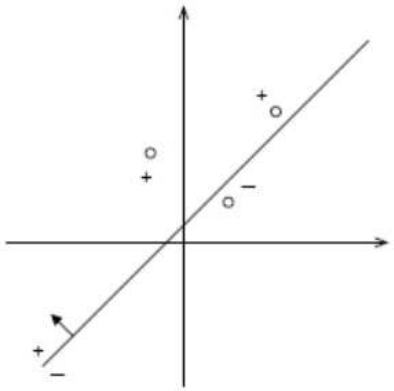
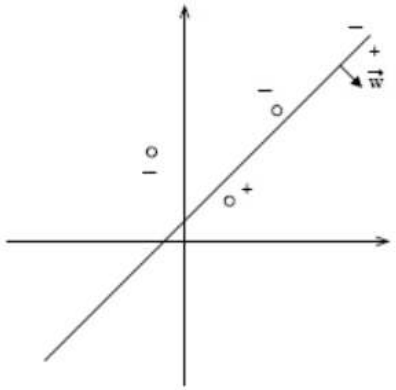
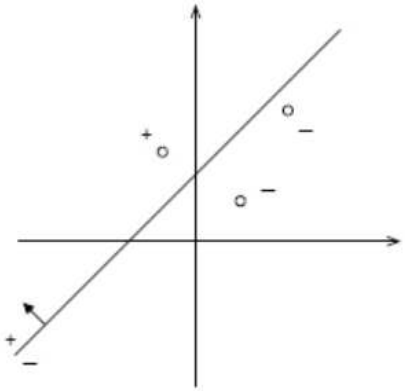
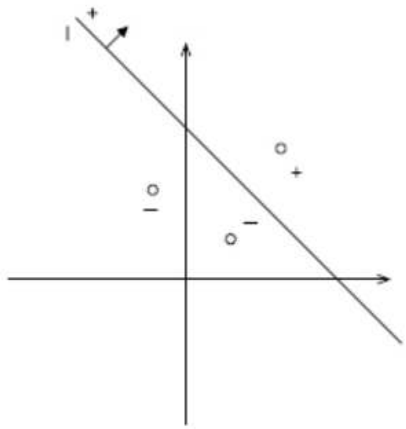
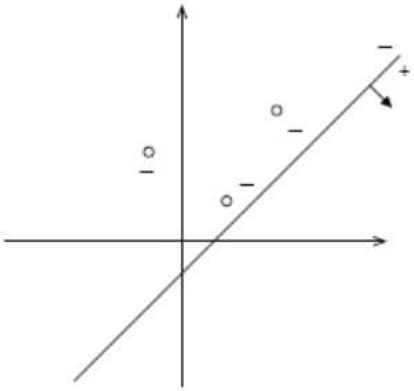
$VC(\mathcal{H}) \geq 1$ banale. Vediamo cosa succede con 2 punti:



VC-dimension: Esempio

Quale è la VC-dimension di $\mathcal{H}_1$?

Quindi $VC(\mathcal{H}) \geq 2$. Vediamo cosa succede con 3 punti:

VC-dimension: Esempio

Quale è la VC-dimension di $\mathcal{H}_1$?

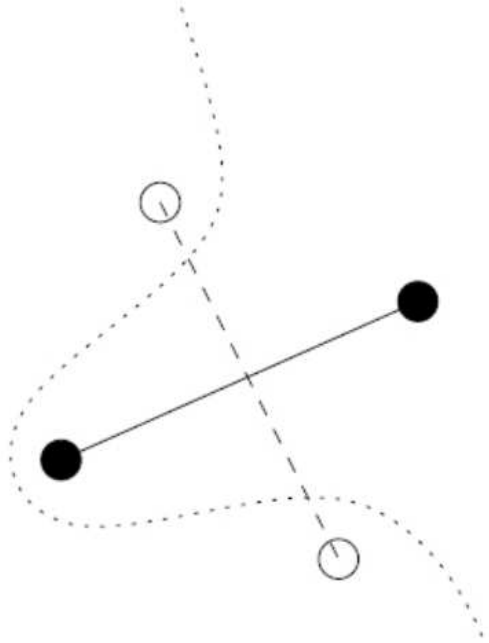
Quindi $VC(\mathcal{H}) \geq 3$. Cosa succede con 4 punti ?

VC-dimension: Esempio

Quale è la VC-dimension di $\mathcal{H}_1$?

Quindi $VC(\mathcal{H}) \geq 3$. Cosa succede con 4 punti ? Non si riesce a frammentare 4 punti!!

Infatti esisteranno sempre due coppie di punti che se unite con un segmento provocano una intersezione fra i due segmenti e quindi, ponendo ogni coppia di punti in classi diverse, per separarli non basta una retta, ma occorre una curva. Quindi $VC(\mathcal{H}) = 3$



Bound sull'Erorre Ideale per Classificazione Binaria

Consideriamo un problema di classificazione binario (i.e., apprendimento di concetti). Dati

- Training Set $Tr = \{(\boldsymbol{x}^{(1)}, f(\boldsymbol{x}^{(1)})), \ldots, (\boldsymbol{x}^{(N_{tr})}, f(\boldsymbol{x}^{(N_{tr})}))\}$
- Spazio delle Ipotesi $\mathcal{H} = \{h_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x}) | \boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^k\}$
- Algoritmo di Apprendimento L che restituisce l'ipotesi $h_{\boldsymbol{w}^*}(\boldsymbol{x})$, dove $\boldsymbol{w}^*$ minimizza l'errore empirico $\boldsymbol{error_{Tr}(h_w(x))}$

è possibile derivare dei bound sull'errore ideale (detto anche errore di generalizzazione), validi con probabilità $1 - \delta$, che hanno una forma del tipo

$$error_{\mathcal{D}}(h_{\boldsymbol{w}^*}(\boldsymbol{x})) \leq error_{Tr}(h_{\boldsymbol{w}^*}(\boldsymbol{x})) + \epsilon(N_{tr}, VC(\mathcal{H}), \delta)$$

Esempio:

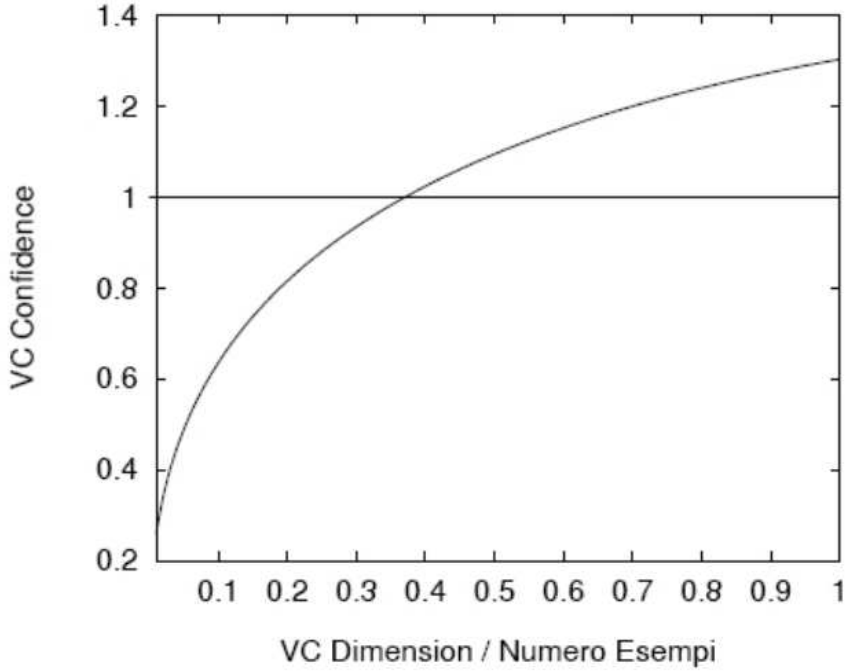
$$error_{\mathcal{D}}(h_{\boldsymbol{w}^*}(\boldsymbol{x})) \leq \underbrace{error_{Tr}(h_{\boldsymbol{w}^*}(\boldsymbol{x}))}_{A} + \underbrace{\sqrt{\frac{VC(\mathcal{H})}{N_{tr}}(\log(\frac{2N_{tr}}{VC(\mathcal{H})}) + 1) - \frac{1}{N_{tr}}\log(\delta)}}_{B}$$

Bound sull'Erorre Ideale per Classificazione Binaria

Si noti che

- il termine A DIPENDE SOLO dalla ipotesi restituita dall'algoritmo di apprendimento L;
- il termine B è INDIPENDENTE dalla ipotesi restituita dall'algoritmo di apprendimento L; in particolare dipende dal rapporto fra VC-dimension dello spazio delle ipotesi $\mathcal{H}$ e il numero di esempi di apprendimento (N_{tr}), oltre ovviamente che dalla confidenza $(1 - \delta)$ con cui il bound è valido.

Il termine B è usualmente chiamato VC-confidence e risulta essere monotono rispetto al rapporto $\frac{VC(\mathcal{H})}{N_{tr}}$; fissato N_{tr} aumenta all'aumentare di $VC(\mathcal{H})$.



Structural Risk Minimization

Problema: all'aumentare della VC-dimension diminuisce l'errore empirico (termine A), ma aumenta la VC confidence (termine B)!

L'approccio Structural Risk Minimization tenta di trovare un compromesso tra i due termini:

Si considerano $\mathcal{H}_i$ tali che

- $\mathcal{H}_1 \subseteq \mathcal{H}_2 \subseteq \cdots \subseteq \mathcal{H}_n$
- $VC(\mathcal{H}_1) \leq \cdots \leq VC(\mathcal{H}_n)$
- si seleziona l'ipotesi che ha il bound sull'errore ideale più basso

Esempio: Reti neurali con un numero crescente di neuroni nascosti