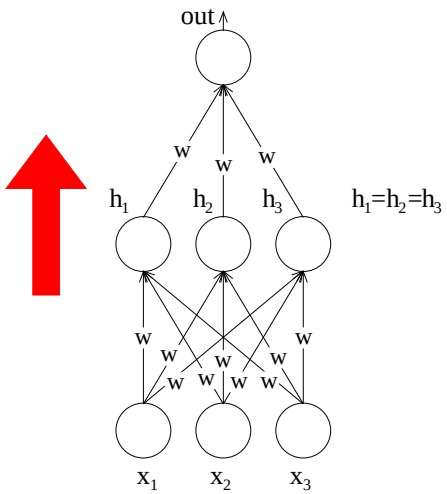
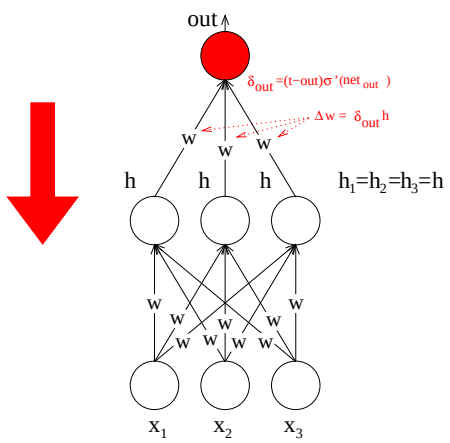
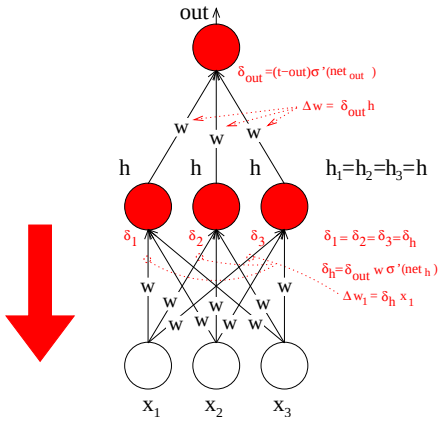
Simmetrie



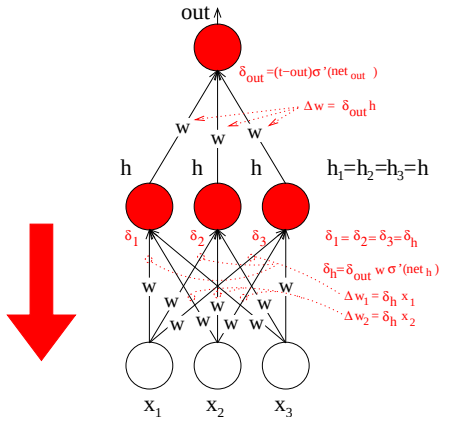
Simmetrie



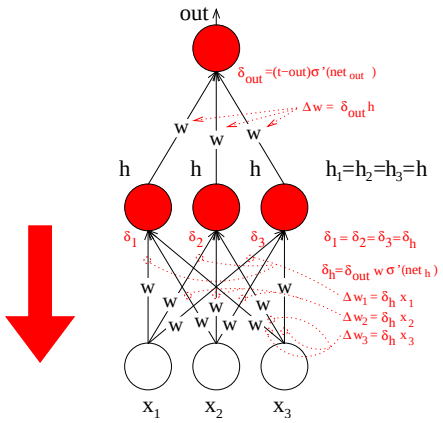
Simmetrie



Simmetrie



Simmetrie



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 $\mathcal{H} = \{h_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x}) | \boldsymbol{w} \in I\!R^k\}$
- Algoritmo di Apprendimento L che restituisce l'ipotesi $h_{\boldsymbol{w}^*}(\boldsymbol{x})$, dove $\boldsymbol{w}^*$ minimizza l'errore empirico $error_{Tr}(h_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{x}))$

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:

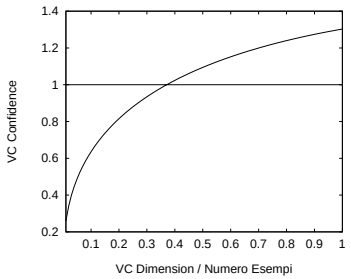
$$error_{\mathcal{D}}(h_{\boldsymbol{w}^*}(\boldsymbol{x})) \leq \underbrace{error_{Tr}(h_{\boldsymbol{w}^*}(\boldsymbol{x}))}_{A} + \underbrace{\sqrt{\frac{VC(\mathcal{H})}{N_{tr}}(\log(\frac{2N_{tr}}{VC(\mathcal{H})}) + 1) - \frac{1}{N_{tr}}\log(\delta)}}_{B}$$

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

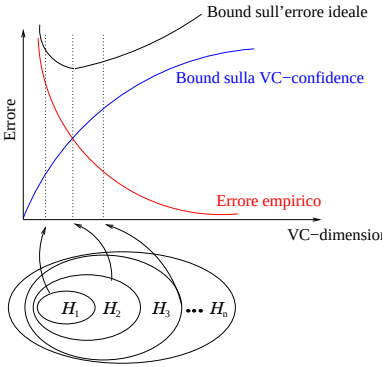
Problema: all'aumentare della VC-dimension diminuisce l'errore empirico (termine A), ma aumenta la VC confidence (termine B)!

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 pi`u basso

Esempio: Reti neurali con un numero crescente di neuroni nascosti



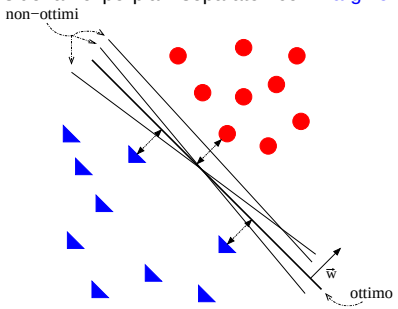
Support Vector Machines: idea base

Possiamo applicare l'approccio Structural Risk Minimization a spazi delle ipotesi costituiti da iperpiani ?

Sappiamo che un iperpiano in uno spazio a m dimensioni ha $VC = m + 1$. Come facciamo a creare una struttura di spazi delle ipotesi con VC-dimension crescente ?

Bisogna porre dei vincoli sugli iperpiani! Consideriamo iperpiani separatori con margine r

Consideriamo il caso in cui gli esempi siano linearmente separabili.
Il margine r è la "distanza" fra l'iperpiano e l'esempio più vicino.
L'iperpiano con margine maggiore è detto ottimo.



Margine

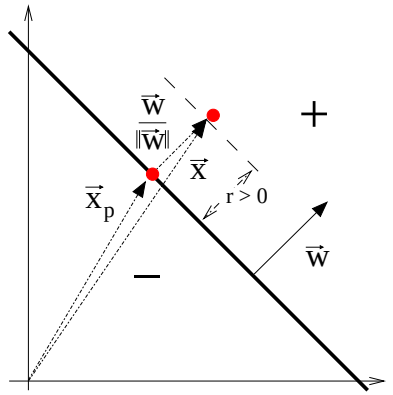
La "distanza" di un vettore da un iperpiano la possimo misurare in senso algebrico.

Dato un iperpiano determinato dalla equazione $\vec{w} \cdot \vec{x} + b = 0$, la funzione discriminante $g(\vec{x}) = \vec{w} \cdot \vec{x} + b$ restituisce la distanza algebrica di $\vec{x}$ dall'iperpiano.

Infatti, se esprimiamo $\vec{x}$ come

$$\vec{x} = \vec{x}_p + r\frac{\vec{w}}{||\vec{w}||}$$

dove $\vec{x}_p$ è la proiezione normale di $\vec{x}$ sull'iperpiano ed r è la distanza algebrica desiderata ($r > 0$ se $\vec{x}$ è sul lato positivo dell'iperpiano, altrimenti $r < 0$), allora $g(\vec{x}_p) = 0$ (poiché $\vec{x}_p$ risiede sull'iperpiano).



Quindi

$$g(\vec{x}) = \vec{w} \cdot \vec{x} + b = r||\vec{w}||$$

o meglio $r = \frac{b}{||\vec{w}||} = \frac{g(\vec{x})}{||\vec{w}||}$

Si noti che per l'iperpiano ottimo, la distanza assoluta da uno degli esempi positivi più vicini è uguale a quella da uno degli esempi negativi più vicini. Il margine di separazione ρ è quindi definito come il doppio del margine: $\rho = \frac{2}{||\vec{w}||}$

Inoltre, se gli esempi sono linearmente separabili con margine $\hat{r}$ da un iperpiano, allora

$$\frac{y_i g(\vec{x}_i)}{||\vec{w}||} \geq \hat{r} \quad i = 1, \ldots, n$$

dove $y_i = 1$ per esempi positivi e $y_i = -1$ per esempi negativi. Il problema di trovare l'iperpiano ottimo si riduce quindi a quello di minimizzare $||\vec{w}||$.

Poichè esistono una infinità di soluzioni che differiscono solo per un fattore di scala su $\vec{w}$ (si noti che l'iperpiano non cambia scalando il suo vettore normale) ci si limita per convenzione a soluzioni che soddisfano l'equazione $\hat{r}||\vec{w}|| = 1$

Margine: Legame con SRM

Theorema *Sia R il diametro della palla più piccola che contiene tutti gli esempi di apprendimento. L'insieme di iperpiani ottimi descritti dall'equazione* $\vec{w} \cdot \vec{x} + b = 0$ *possiede VC-dimension* h *limitata superiormente da*

$$h \leq \min\{\lceil \tfrac{R^2}{\rho^2} \rceil, m\} + 1$$

dove $\rho = \frac{2}{||\vec{w}||}$ *ed* m *è la dimensionalità dei dati di apprendimento.*

Quindi, se consideriamo gli spazi delle ipotesi

$$\mathcal{H}_k = \{\vec{w} \cdot \vec{x} + b \mid ||\vec{w}||^2 \leq c_k\} \text{ con } c_1 < c_2 < c_3 < \ldots$$

ed i dati sono linearmente separabili, allora l'errore empirico è nullo per tutti gli iperpiani e quindi per minimizzare il bound sull'errore ideale si deve selezionare l'iperpiano con VC-dimension minima, cioè quello che minimizza $||\vec{w}||^2$ (o equivalentemente massimizza il margine di separazione).

Caso Separabile: Formulazione Quadratica

Nel caso di n esempi $\{(\vec{x}_i, y_i)\}_1^n$ linearmente separabili, è possibile trovare l'iperpiano ottimo risolvendo il seguente problema vincolato di ottimizzazione quadratica:

$$\min_{\vec{w},b} \frac{1}{2}||\vec{w}||^2$$
$$\text{soggetto a: } \forall i \in \{1,\ldots,n\} : y_i(\vec{w}\cdot\vec{x}_i + b) - 1 \geq 0$$

Questo problema, detto problema primale, si può risolvere più facilmente passando alla sua formulazione duale.

La teoria della ottimizzazione afferma che:

1. un problema di ottimizzazione possiede una forma duale (più semplice da risolvere) se la funzione di costo e i vincoli sono strettamente convessi;
2. se le condizioni in 1 sono soddisfatte, l'ottimo per il problema duale coincide con l'ottimo del primale.

Il nostro problema primale soddisfa le condizioni in 1.

Per passare dal primale alla sua forma duale si utilizza il teorema Kuhn-Tucker, che prescrive i seguenti due passi:

1. a partire dalla formulazione primale si costruisce un nuovo problema non vincolato utilizzando i moltiplicatori di Lagrange:

   $$L(\vec{w},b,\alpha) = \frac{1}{2}||\vec{w}||^2 - \sum_{i=1}^{n}\alpha_i(y_i(\vec{w}\cdot\vec{x}_i + b) - 1)$$

   dove le variabili $\alpha_i \geq 0$ sono i *moltiplicatori di Lagrange* (in questo caso, variabili duali). La soluzione ottima risiede nel punto di sella ottenuto minimizzando la funzione Lagrangiana $L(\vec{w},b,\alpha)$ rispetto alle variabili primali $\vec{w}$ e b, e massimizzandola rispetto alle variabili duali α_i.

2. si utilizzano le *condizioni* di Kuhn-Tucker per esprimere le variabili primali in funzione delle variabili duali; in questo modo la funzione Lagrangiana diventa funzione esclusiva delle variabili duali e quindi deve essere massimizzata rispetto a queste variabili:

Vediamo nel dettaglio il passo 2...

Passo 2:

Il teorema Kuhn-Tucker afferma che l'ottimo si ottiene minimizzando $L(\vec{w},b,\alpha)$ rispetto a $\vec{w}$ e b, quindi bisogna che il corrispondente gradiente della funzione sia nullo:

$$\frac{\delta L(\vec{w},b,\alpha)}{\delta \vec{w}} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \vec{w^*} = \sum_{i=1}^{n} y_i\alpha_i^*\vec{x}_i \text{ E1}$$
$$\frac{\delta L(\vec{w},b,\alpha)}{\delta b} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \sum_{i=1}^{n} y_i\alpha_i^* = 0 \text{ E2}$$

Inoltre il teorema Kuhn-Tucker afferma che all'ottimo

$$\alpha_i^*[y_i(\vec{w^*}\cdot\vec{x}_i + b^*) - 1] = 0 \;\; i = 1,\ldots,n$$

I vettori per cui $\alpha_i^* > 0$ sono detti vettori di supporto.

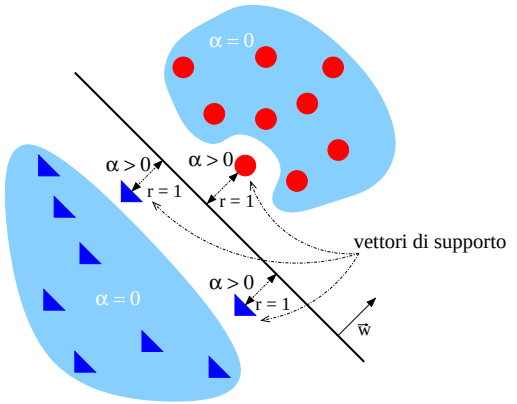
La formulazione duale si ottiene eliminando le variabili primali (equazioni E1 ed E2) dalla funzione Lagrangiana:

$$\max_\alpha \sum_{i=1}^{n}\alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} y_iy_j\alpha_i\alpha_j\vec{x}_i\cdot\vec{x}_j$$
$$\text{soggetto a: } \forall i \in \{1,\ldots,n\} : \alpha_i \geq 0 \text{ e } \sum_{i=1}^{n} y_i\alpha_i = 0.$$

I valori ottimi delle α_i^* determinano l'iperpiano ottimo grazie ad E1, a meno del valore di b.

Il valore di b, tuttavia, si può ottenere osservando che per un qualsiasi vettore di supporto $\vec{x}_s$ deve valere $\boxed{y_s(\vec{w^*}\cdot\vec{x}_s + b^*) = 1}$ e quindi considerando un esempio positivo ($y_s = 1$)

$$b^* = 1 - \vec{w^*}\cdot\vec{x}_s$$



Caso Non Separabile

Cosa succede se gli esempi NON sono linearmente separabili ?

In questo caso si deve ammettere che alcuni dei vincoli possano essere violati. Ciò si può fare:

- introducendo le variabili *slack* $\xi_i \geq 0,\ i = 1, \ldots, n$, una per ogni vincolo:

$$y_i(\vec{w} \cdot \vec{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i$$

- modificando la funzione costo in modo da penalizzare variabili slack che non sono a 0:

$$\frac{1}{2}||\vec{w}||^2 + C\sum_{i=1}^{n} \xi_i$$

dove C (parametro di regolarizzazione) è una costante positiva che controlla il tradeoff tra la complessità dello spazio delle ipotesi e il numero di esempi non-separabili.

Il duale di questa nuova formulazione è molto simile al precedente:

$$\max_\alpha \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} y_i y_j \alpha_i \alpha_j \vec{x}_i \cdot \vec{x}_j$$

soggetto a: $\forall i \in \{1, \ldots, n\} : 0 \leq \alpha_i \leq C$ e $\sum_{i=1}^{n} y_i \alpha_i = 0$.

La differenza risiede nel fatto che le variabili duali sono ora limitate superiormente da C. Per la determinazione di b^* si procede in modo simile a quanto visto in precedenza (anche se con alcune differenze...).