Strojno učenje
Osnove teorije SU

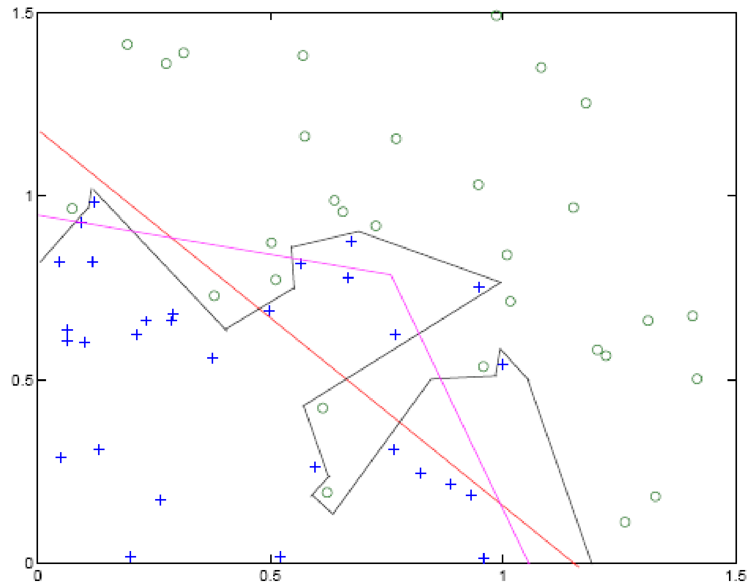
Tomislav Šmuc

PMF, Zagreb, 2022

Teorija (računalnog) strojnog učenja (TSU)

COmputational Learning Theory (COLT)

Nothing is more practical than a good theory (V. Vapnik)
(Kurt Lewin)



Literatura:

- Machine learning, T. Mitchel (ch. 7)
- The Nature of Statistical Learning Theory, V. Vapnik
- The Elements of Statistical Learning, Hastie et al. (ch 7)

Bousquet, Boucheron, Lugosi:
Introduction to Statistical Learning Theory,
Advanced Lectures on Machine Learning
Lecture Notes in Artificial Intelligence 3176, 169-207.

C.J.C. Burges:
A tutorial on support vector machines for pattern recognition.
Data Mining and Knowledge Discovery, 2(2):955-974, 1998.

Computational Learning Theory
(COLT- Computational Learning Theory)
- daje kvantitativne granice na pitanja vezana uz učenje na osnovu primjera

...u zavisnosti o svojstvima problema, algoritma

- ❑ Veličini i kompleksnosti prostora hipoteza/modela
- ❑ Točnosti do koje želimo aproksimirati ciljni koncept
- ❑ Vjerojatnosti da će algoritam naučiti uspješnu hipotezu
- ❑ Broju primjera potrebnih za određenu točnost
- ❑ Načinu kako su primjeri prezentirani “učeniku/algoritmu”

Koliko primjera nam treba, da bi naučili neki koncept ?

Zavisi i o načinu-redoslijedu prezentiranja primjera !

Barem 3 različita načina prezentiranja primjera:

- učenik postavlja primjere <***x*,?** > za koje učitelj daje vrijednosti *f(**x**)*
- učitelj (koji zna vrijednosti ciljne funkcije *f*) daje primjere <***x***,*f*(***x***)> učeniku
- primjeri dolaze prema nekom slučajnom redoslijedu <***x*,?** > (okolina, priroda), a na njih učitelj daje vrijednosti f(**x**)

Induktivno učenje

Tražimo h takav da vrijedi :

$$(\forall \langle x_i, f(x_i) \rangle \in T) \quad (B \wedge h \wedge x_i) \vdash f(x_i)$$

- *h* – je hipoteza(model) koja reprezentira/aproksimira ciljni koncept *c(=f(**x**)),* u idealnom slučaju – *h(**x**)=f(**x**).* ***B*** predstavlja neko prethodno znanje o problemu.
- ono što u najboljem slučaju možemo garantirati učenjem nekim algoritmom strojnog učenja jest da naučena hipoteza *h* dobro aproksimira ciljni koncept *c* nad skupom primjera za učenje *T*

- ***Osnovna hipoteza induktivnog učenja:***

  *Bilo koja hipoteza koja dobro aproksimira ciljni koncept na **dovoljno velikom skupu primjera dostupnih za učenje**, isto će tako dobro aproksimirati ciljni koncept i **na novim, još nedostupnim primjerima.***

Induktivno učenje – učenje na osnovu skupa primjera (učenje pod nadzorom)

Skup primjera za učenje (en. Training set) $\subseteq \Delta$

$$T = \{\langle \mathbf{x}_1, y_1 \rangle, \langle \mathbf{x}_2, y_2 \rangle, \ldots \langle \mathbf{x}_n, y_n \rangle\}$$

x **–** ulazni vektor atributa/varijabli:

Primjer: predviđanje dana pogodnih za igranje tenisa

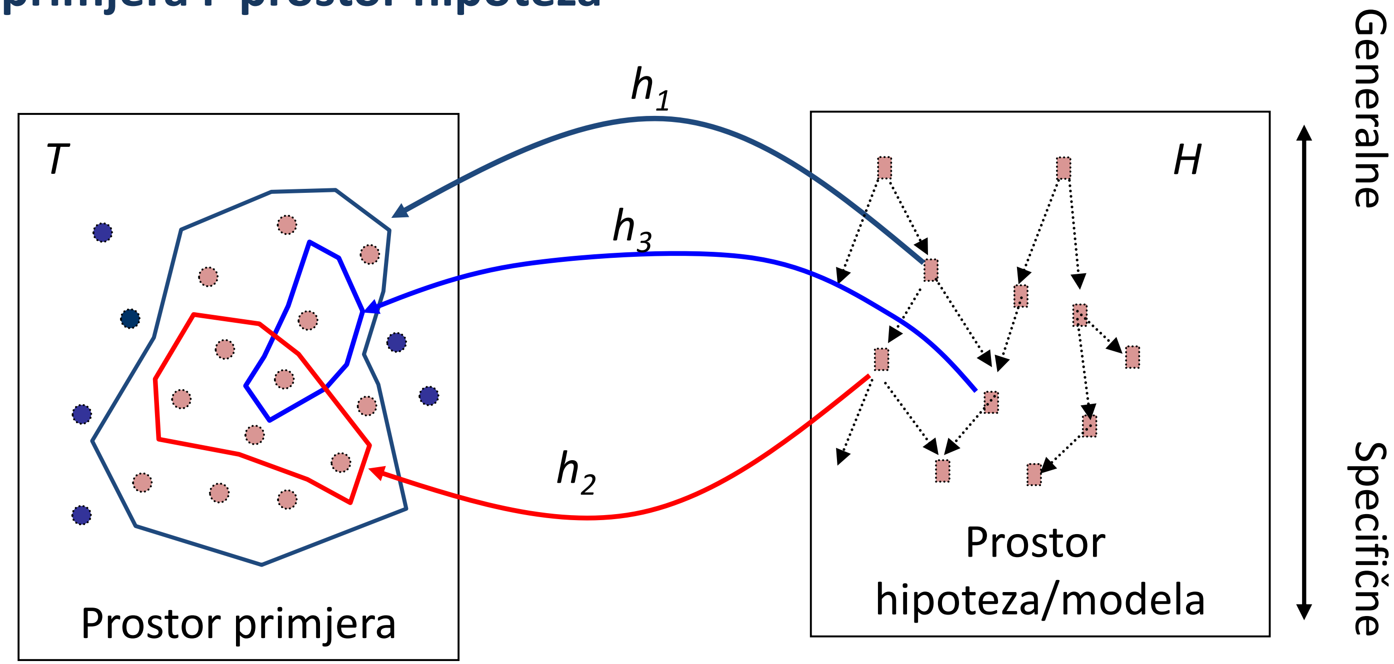
(x_1 (Prognoza), x_2 (Vlažnost), x_3 (Vjetar),....)

y – ciljna varijabla *Igrati_tenis {0,1}*

- *H* – prostor hipoteza/modela – npr.konjunkcija uvjeta na vrijednosti atribute/varijable **x** (npr. $\mathbf{x}_1$ = <sunčano,vlažno/vjetrovito/#>)

- Ciljni koncept *c*: **X**→y
- Δ stvarna i kompletna distribucija svih primjera **X** (***T*** $\subseteq \Delta$)

Prostor primjera i prostor hipoteza



x_1 = *<oblačno, vlažno, vjetrovito, obaveze>*

x_2 = *<sunčano, suho, vjetrovito, bez_obaveza>*

h_1 = *<oblačno, #, #, #>*

h_2 = *<oblačno, suho, #, # >*

h_3 = *<oblačno, suho, #, obaveze >*

Dva viđenja greške pri induktivnom učenju

Greška na skupu za učenje hipoteze ***h*** s obzirom na ciljani koncept *c*

- mjeri kako često *h(**x**)≠ c(**x**)* na skupu primjera iz *T*

$$e_T(h) \equiv \underset{x \in T}{P}\left[h(x) \neq c(x)\right] \equiv \frac{\sum_{x \in T} \delta(h(x) \neq c(x))}{|T|}$$

Stvarna greška hipoteze ***h*** s obzirom na ciljani koncept ***c***

- mjeri kako često *h(**x**)≠ c(**x**)* na bilo kojem skupu slučajno odabranih primjera na osnovu distribucije Δ

$$e_\Delta(h) \equiv \underset{x \in \Delta}{P}\left[h(x) \neq c(x)\right]$$

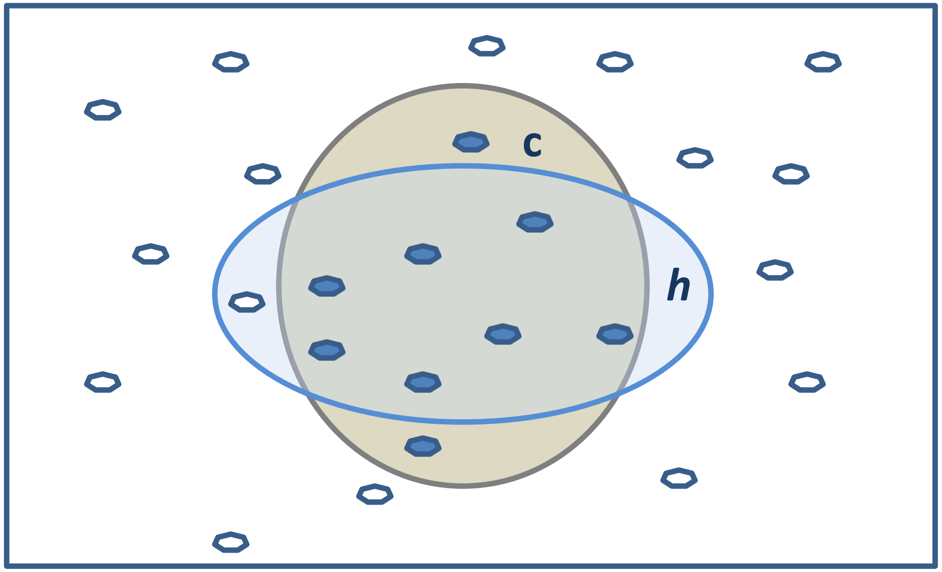
Skup primjera

Distribucija vjerojatnosti

Dva viđenja greške pri induktivnom učenju

Možemo li <u>predvidjeti stvarnu grešku</u> na osnovu <u>izmjerene greške na dostupnom skupu primjera</u> ?

Prostor primjera $X_{P(X)=\Delta}$



PAC Learning – Probably Approximately Correct (1988, Haussler)

Pretpostavimo da imamo klasu mogućih ciljnih koncepata *C* definiranu preko skupa primjera *X* veličine *n*, te algoritam učenja *L* koji koristi prostor hipoteza *H.*

Definicija:

Koncept iz *C* je moguće naučiti u ***PAC smislu*** od strane algoritma *L* korištenjem prostora hipoteza *H,* ako za sve $c \in C$, te distribuciju Δ preko primjera *X,* konstantu ε takvu da vrijedi $0< \varepsilon < ½$, i vjerojatnost δ ($0< \delta < ½$), algoritam *L* s vjerojatnošću najmanje ($1- \delta$) vraća hipotezu $h \in H$ takvu da za nju vrijedi $e_\Delta(h) \leq \varepsilon$, u vremenu koje je polinomijalno s obzirom na $1/\varepsilon$, $1/\delta$, n i $|C|$.

(svodi se na to da: *L* treba samo polinomijalni broj primjera za učenje, te da je i vrijeme procesiranja po primjeru polinomijalno !!)

PAC Learning – Probably Approximately Correct (1988, Haussler)

PAC Learning princip – jednostavnim riječima:

- Ukoliko je neka **hipoteza izrazito pogrešna** - tada će to biti **vidljivo već na malom podskupu primjera** (velika greška), s velikom vjerojatnošću;
- I obratno - za bilo koju **hipotezu konzistentnu s dovoljno velikim brojem** primjera malo je vjerojatno da je izrazito pogrešna

- t.j. **vjerojatno je približno točna (PAC)**

Podprostor konzistentnih hipoteza (en. Version space)

- Hipoteza/model ***h je konzistentna*** sa skupom primjera za učenje *T* nekog ciljnog koncepta *c* (**x**) samo ako vrijedi:

$$Konzistentna(h,T) \equiv (\forall (\mathbf{x}, c(\mathbf{x})) \in T)\ h(\mathbf{x}) = c(\mathbf{x})$$

- **Version space – $VS_{H,T}$** definicija :

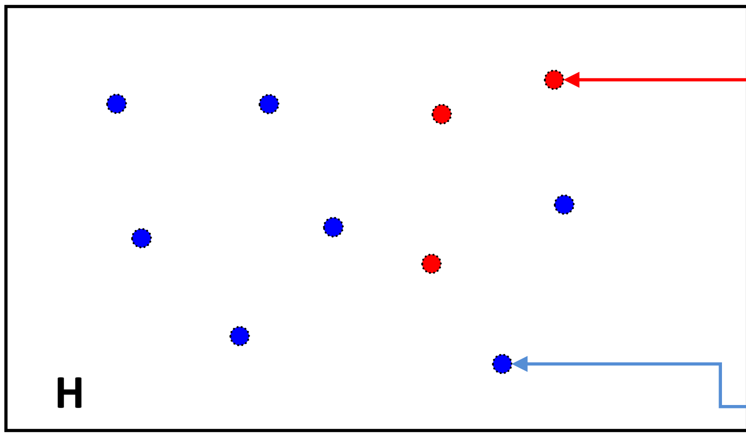
$$VS_{H,T} \equiv \{h \in H \mid Konzistentna\ (h,T)\}$$

Pretpostavlja se da je $c(\mathbf{x}) \in H$!!

$VS_{H,T}$ u odnosu na prostor hipoteza ***H*** i skup primjera predstavlja podskup hipoteza konzistentnih u odnosu na sve primjere skupa ***T***

ε - iscrpivost/kompletnost $VS_{H,T}$ (ε - exhausted $VS_{H,T}$)

Prostor hipoteza H



$VS_{H,T}$

$e_T(h) = 0$

$e_\Delta(h) > 0$ (stvarna greška)

$\neg VS_{H,T}$

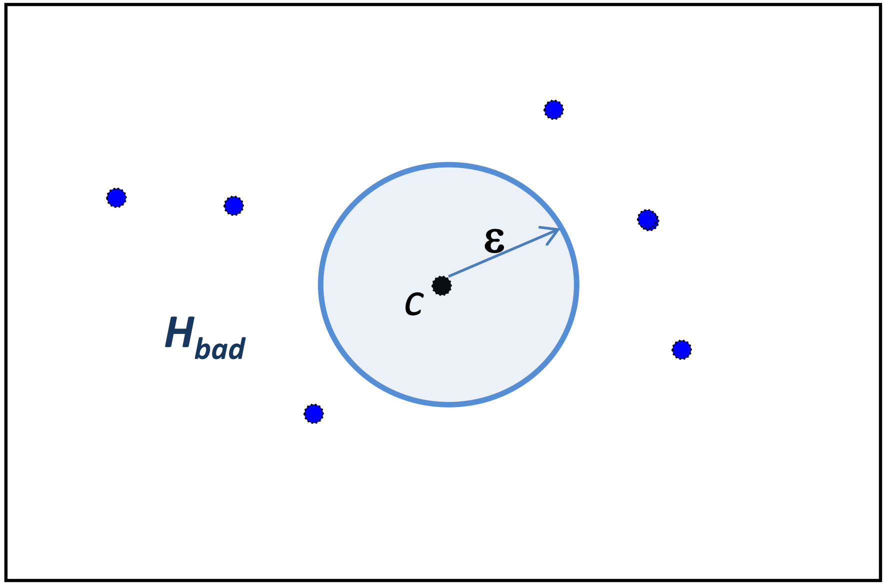
$e_T(h) > 0$

$e_\Delta(h) > 0$ (stvarna greška)

$VS_{H,T}$ je <u>ε - iscrpiv/kompletnost</u> (s obzirom na *c* i *T*) ako za svaku hipotezu/model u $VS_{H,T}$ vrijedi da ima stvarnu grešku manju od ε:

$$(\forall h \in VS_{H,T})\ e_\Delta(h) < \varepsilon$$

Prostor hipoteza H



$(\forall h \in VS_{H,T})\ e_{\Delta}(h) < \varepsilon$

-za svaku takvu h kažemo da je **približno točna (PAC)**

Cilj nam je **pokazati za koliko primjera to vrijedi** za čitav $VS_{H,T}$!

Prostor hipoteza H

Za svaku $h_{bad} \in H_{bad}$

$$e_{\Delta}(h_{bad}) > \varepsilon$$

Za neki novi primjer x_i iz Δ predikcija neke h_{bad} je točna s vjerojatnosti :

$$p\,(e_{\Delta}(h_{bad}) > \varepsilon\,,\, h_{bad}(x_i) = f(x_i)) \leq (1-\varepsilon)$$

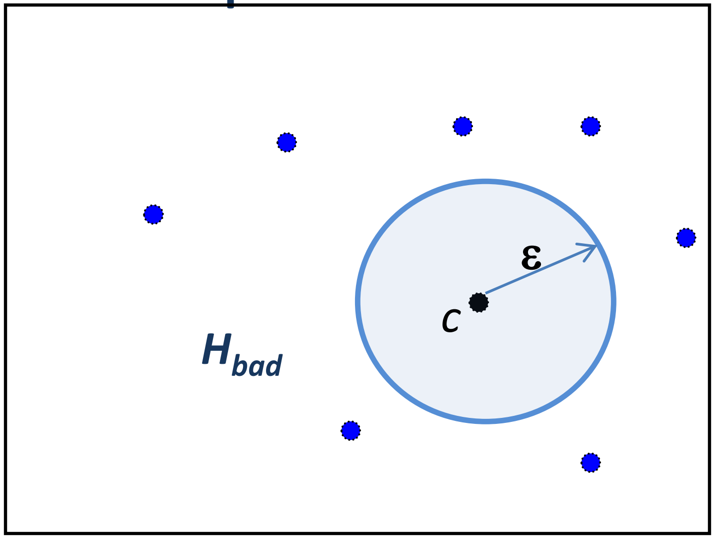
Za N novih primjera x_i iz Δ *vrijedi:*

$$p\,(e_{\Delta}(h_{bad}) > \varepsilon,\, h_{bad}(x_i) = f(x_i),\, \forall x_i \in \{x_1,\ldots,x_N\}) \leq (1-\varepsilon)^N$$

Vjerojatnost da ćemo nabasati na barem jednu hipotezu h za koju vrijedi:

$$p\,(e_{\Delta}(h) > \varepsilon,\, h(x_i) = f(x_i),\, \forall x_i \in \{x_1,\ldots,x_N\}) \leq |H_{bad}|(1-\varepsilon)^N \leq |H|(1-\varepsilon)^N$$

Prostor hipoteza H



Želimo da ova vjerojatnost bude što manja:

$$p(e_{\Delta}(h) > \varepsilon \mid e_{\{x1,\ldots xN\}}(h) = 0) \leq |H|(1-\varepsilon)^N$$

Dakle $|H|(1-\varepsilon)^N \leq \delta$; gdje je δ po volji mali

S obzirom da vrijedi ($\varepsilon \ll 1$): $1-\varepsilon \leq e^{-\varepsilon}$

$$p(e_{\Delta}(h) > \varepsilon \mid e_{\{x1,\ldots xN\}}(h) = 0) \leq |H| e^{-\varepsilon N}$$

ovu ćemo vjerojatnost δ postići nakon učenja na N primjera :

$$N \geq \frac{1}{\varepsilon}(\ln\frac{1}{\delta} + \ln|H|)$$

$$N \geq \frac{1}{\varepsilon}\left(\ln\frac{1}{\delta} + \ln|\mathbf{H}|\right)$$

Ako algoritam vrati hipotezu koja je točna na *N* primjera, tada s vjerojatnošću od najmanje ($1-\delta$) možemo očekivati da je njena stvarna greška najviše ε !

- Veličina |**H**| najviše utječe na *N*

-|**H**| zavisi o “jeziku” kojim je opisan prostor primjera

- Za prostor primjera s *n* binarnih varijabli opisan konjunkcijama Boole-ovih literala (npr. h_i = *<oblačno, vlažno, #, #>*)

- |**H**| = ?

Učenje konjunkcija Boole-ovih literala

- Neka H i neka je stvarni koncept $c \in H$. Neka je H opisan konjunkcijama uvjeta na n Boole-ovih varijabli (=Boole-ovi literali *). U našem primjeru sa igranjem tenisa svaka varijabla ima 3 moguće vrijednosti

  npr. prognoza - (vedro/oblačno/#).

  Tada vrijedi za n varijabli:

  $|H|=3^n$

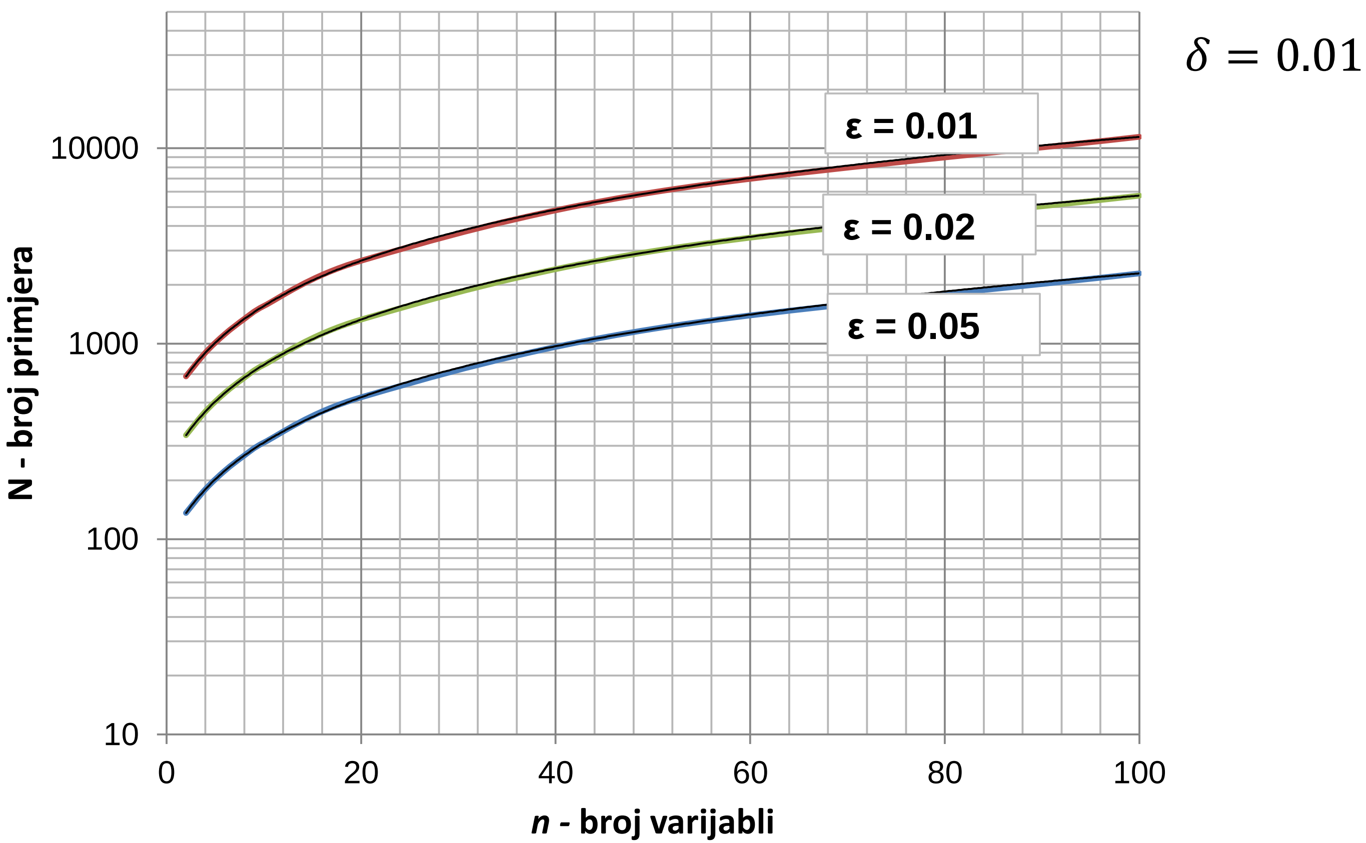
  pa je broj potrebnih primjera:

$$N \geq \frac{1}{\varepsilon}(\ln\frac{1}{\delta} + n\ln 3)$$

Za $\varepsilon=0.05$; $\delta=0.01$; $n=10$

$$N \geq \frac{1}{0.05}(\ln\frac{1}{0.01} + 10\ln 3) = 312 \text{ primjera}$$

$$N \geq \frac{1}{\varepsilon}(\ln\frac{1}{\delta} + n\ln 3)$$



PAC učenje - kad vrijedi c $\in$ *H*

$$N \geq \frac{1}{\varepsilon}(\ln\frac{1}{\delta} + \ln|\mathbf{H}|)$$

Što ako želimo moći naučiti bilo koji ciljni koncept (c $\in$ C) koji možemo zamisliti nad skupom primjera opisanim uvjetima na *n* Boole-ovih varijabli (**disjunkcije, negacije, konjunkcije**) ?

|C| =?

$$|C| = 2^{3^n}$$!!

želimo li c $\in$ *H* **=>** $N \geq \frac{1}{\varepsilon}(\ln\frac{1}{\delta} + 3^n \ln 2)$

PAC učenje - kad vrijedi c $\in H$

$|C| = 2^{3^n}$ želimo li c $\in H$ **=>** $N \geq \frac{1}{\varepsilon}(\ln \frac{1}{\delta} + 3^n \ln 2)$

Kako ograničiti broj potrebnih primjera ?

Osnovna dilema:

a) Napraviti restrikcije na prostor hipoteza (restrikcija jezika, reprezentabilnih funkcija)
b) Dovoljno kompleksan prostor, ali inzistirati da konzistentne hipoteze budu što jednostavnije

PAC učenje - kad **ne** vrijedi c $\in H$ (agnostičko učenje)

- Možemo probati naučiti *h* koja radi najmanje grešaka na *T !*
- Koliko nam tada treba primjera ? Kako mjerimo stvarnu grešku ?
  - U tom slučaju - možemo samo garantirati (za bilo koju *h*!):

$$P\left[e_{\Delta}(h) > e_T(h) + \varepsilon\right] \leq e^{-2N\varepsilon^2}$$

  - moramo garantirati da ovo vrijedi za svaku iz H - pa onda i za najbolju*!*

$$P\left[(\exists h \in H) \mid e_{\Delta}(h) > e_T(h) + \varepsilon\right] \leq |H| e^{-2N\varepsilon^2}$$

  - ako gornju vjerojatnost proglasimo δ možemo opet doći do toga koliko nam promjera treba:

$$N \geq \frac{1}{2\varepsilon^2}(\ln\frac{1}{\delta} + \ln|\mathbf{H}|)$$

Ovo nije garancija da će algoritam naći najbolju *h* !

Napomena: ε je sada samo razlika između $e_{\Delta}(h)$ i $e_T(h)$

PAC učenje - sažetak

- Konačni prostor H, i $c \in H$, vrijedi:

$$P\left[\exists h \in H \mid (e_\Delta(h) > \varepsilon) \wedge (e_T(h) = 0)\right] \leq \mid H \mid e^{-\varepsilon \cdot N}$$

pa možemo garantirati da je za točnost ε uz vjerojatnost $P \leq \delta$

dovoljno $N \geq \frac{1}{\varepsilon}(\ln\frac{1}{\delta} + \ln|\mathbf{H}|)$ primjera

- Konačni prostor H i vjerojatno $c \notin H$ vrijedi

$$P\left[(\exists h \in H) \mid e_\Delta(h) > e_T(h) + \varepsilon\right] \leq |H| e^{-2N\varepsilon^2}$$

pa možemo garantirati da je za točnost ε uz vjerojatnost $P \leq \delta$

dovoljno $N \geq \frac{1}{2\varepsilon^2}(\ln\frac{1}{\delta} + \ln|\mathbf{H}|)$ primjera

PAC učenje - problem određivanja broja primjera kad $|H| \rightarrow \infty$

Osnovna dilema:

a) Napraviti restrikcije na prostor hipoteza H (restrikcija jezika, reprezentabilnih funkcija) = konačni H => PAC bounds
b) Dovoljno kompleksan prostor H, ali inzistirati da konzistentne hipoteze budu što jednostavnije = beskonačni H ????

Vapnik-Chervonenkis dimenzija !

Shattering => Sposobnost particioniranja skupa primjera od strane nekog prostora hipoteza H

(en. shattering; hr.drobljenje, razbijanje)

Definicija. Skup primjera $S=\{\mathbf{x}_i\}_{i=1,N}$ moguće je ***particionirati/rastaviti*** skupom hipoteza *H*, onda i samo onda ako za svaku ***dihotomiju*** skupa *S*, postoji $h \in H$ koja je konzistentna s takvom dihotomijom.

Dihotomija. Particija skupa primjera *S* u npr. pozitivne i negativne primjere.
Npr. za $N = 3$: postoji 2^3 mogućih dihotomija.

Skup *S* je moguće ***particionirati/rastaviti*** skupom hipoteza *H*, ako za svaku particiju primjera iz *S* u pozitivne i negativne primjere, postoji hipoteza/funkcija *h* iz *H* koja daje upravo iste oznake primjerima

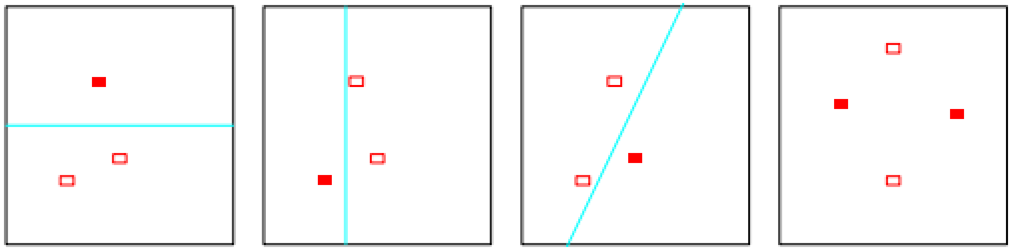
(Intuitivno: Kompleksniji skup funkcija *H* može ***particionirati*** veći skup S!)

Definicija (Vapnik-Chervonenkis dimenzija skupa hipoteza *H* - *VC(H)*)

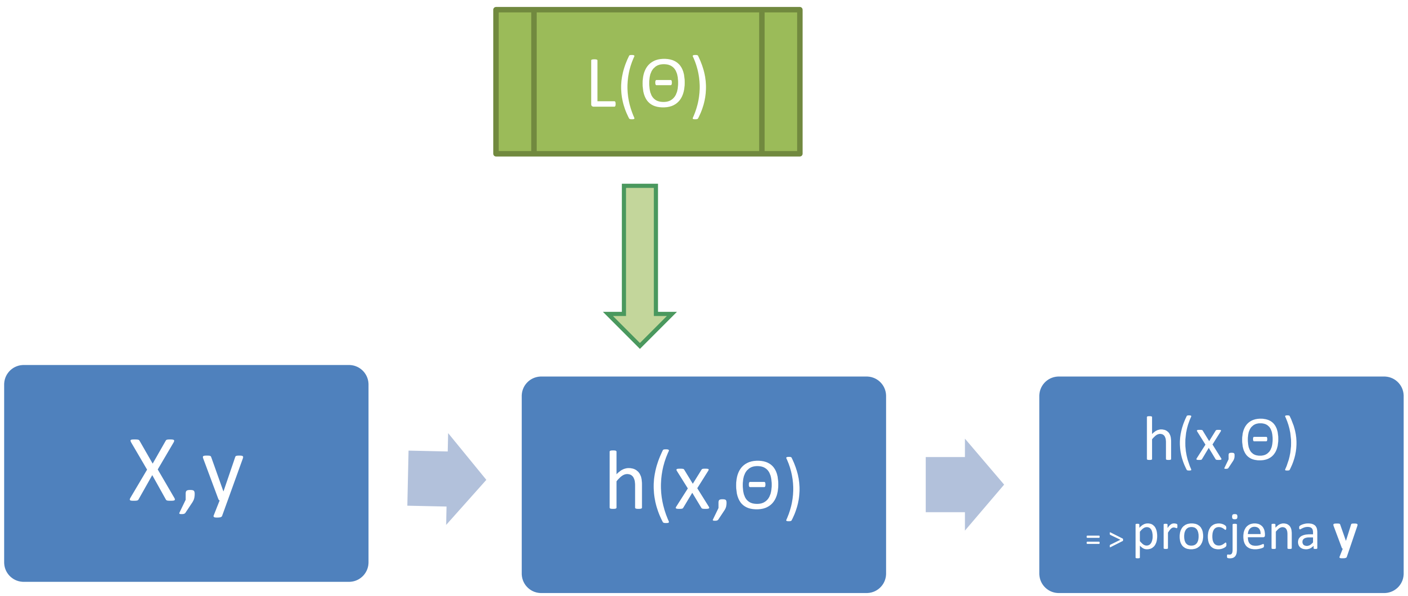
VC(H) prostora hipoteza H, definiranog preko prostora primjera X **je veličina najvećeg podskupa od X** koji je moguće particionirati/rastaviti korištenjem H. Ako je pomoću H moguće rastaviti po volji velike podskupove X, tada vrijedi VC(H)≡ ∞.

(*h Є H* mogu generirati bilo koju klasifikaciju na skupu primjera *S*)

Primjer (ESL, ch7): pravci i primjeri (X) u ravnin, VC=??



h(x,Θ) **predstavlja neku funkciju koju možemo naučiti algoritmom** ***L***



H kao proizvod algoritma strojnog učenja....

Algoritam *L* može particionirati skup točaka S onda ako:

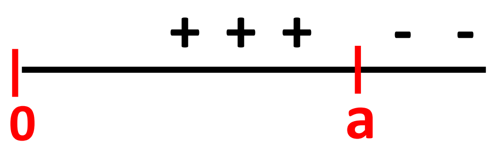
Za svaku moguću dihotomiju u obliku $(x_1,y_1), (x_2,y_2),...(x_n,y_n)$ ..... može naučiti/proizvesti funkciju $h(x,\Theta)$ koja apsolutno točno razdvaja primjere tog skupa (ima grešku =0!)

Postoji 2^n takvih dihotomija, s različitim kombinacijama $y \in (+1,-1)$

Primjeri h(x,Θ) i određivanja VC(h)

Polu-intervali:

h(x, Θ) ∈ H ; H - intervali tipa [0,a), za neki realni a>0



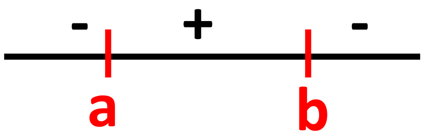
VC(h(x, Θ)) = ?

|H|= ?

Primjeri h(x,Θ) i određivanja VC(h)

Intervali

$h(x, \Theta) \in H$; H - intervali na realnoj osi - [a,b] | b>a



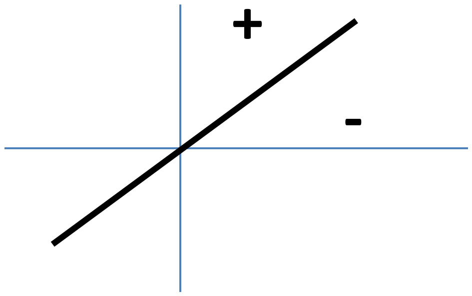
$VC(h(x, \Theta)) = ?$

$|H| = ?$

Primjeri $h(x, \Theta)$ i određivanja VC(h)

Poluprostori - 1
$h(x, \Theta) \in H$

$h(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Theta})=\mathrm{sign}(x \cdot \Theta)$



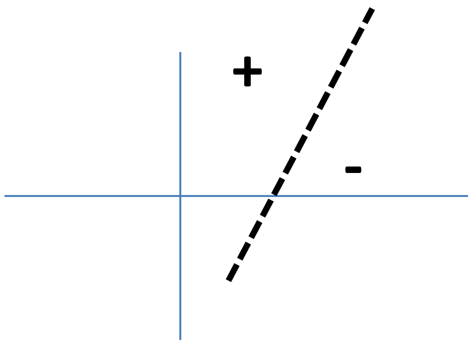
$VC(h(x, \Theta)) = ?$
$|H| = ?$

Primjeri $h(x,\Theta)$ i određivanja VC(h)

Poluprostori - 2

$h(x, \Theta) \in H$

$h(\mathbf{x}, \mathbf{\Theta})=\text{sign}(x \cdot \Theta_1 + \Theta_2)$



$VC(h(x, \Theta)) = ?$

$|H| = ?$

VC dimenzija prostora hipoteza H na prostoru primjera **X** je veličina najvećeg konačnog podskupa **x** koji se može rastaviti hipotezama iz **H**
(makar to bio samo jedan podskup te veličine!)

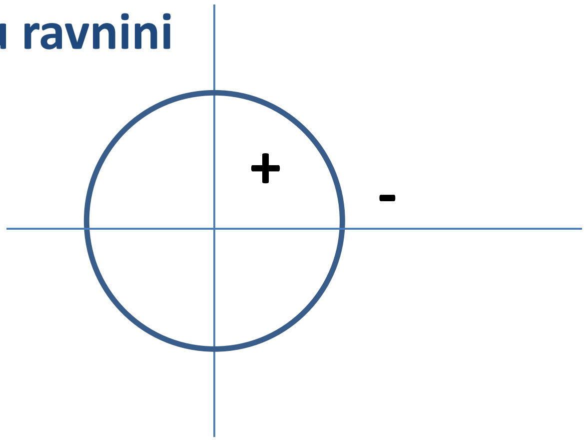
Ako postoji podskup veličine **d** koji se može rastaviti, tada vrijedi - VC(H) >=d
Ako ne postoji podskup veličine **d** koji se može rastaviti, tada vrijedi - VC(H) < d

VC(Poluintervali) = 1 (podskup veličine **2** se ne može rastaviti)
VC(Intervali) = 2 (podskup veličine **3** se ne može rastaviti)
VC(Poluprostori 1) = 2 (podskup veličine **3** se ne može rastaviti)

Drugi primjeri h(x,Θ), VC(h) - za vježbu ?

$h(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Theta}) \in H$; – kružnice u ravnini

$h(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Theta})=\mathrm{sign}(\Theta_1 \cdot x \cdot x - \Theta_2)$



....

- VC (**w*x -b**) – gdje je **x** – n dimenzionalni prostor
- VC(sin(x))
- VC(stabla odlučivanja)
- VC(perceptron)
- VC(neuralne mreže)

Određivanje VC dimenzije je zahtjevno za kompleksnije prostora hipoteza

Gornja granica broja primjera

PAC učenje – uz korištenje VC(H) => Structural Risk Minimization (SRM)

$$N \geq \frac{1}{\varepsilon}\left(4\log_2(2/\delta) + 8VC(H)\log_2(13/\varepsilon)\right)$$

Osim toga Vapnik je pokazao da s vjerojatnošću (1-η) vrijedi

$$e_{\Delta} \approx e_{test} \leq e_T + \sqrt{\frac{VC(H)(\log(2N/VC(H))+1)-\log(\eta/4)}{N}}$$

Dakle – imamo procjenu greške na novim primjerima na osnovu greške na skupu za učenje i VC (H) !

Structural Risk Minimization (Vapnik)

Pretpostavimo da imamo na izbor niz algoritama („strojeva”)
– koji uče hipoteze iz prostora H_i (funkcije) različitih $VC(H_i)$ tako da vrijedi:

$$VC(H_1) \leq VC(H_2) \leq VC(H_3) \leq VC(H_4) \leq \ldots \leq VC(H_N)$$

Koji ćemo od “strojeva” - algoritama koristiti ?
- Treniramo svaki od strojeva i mjerimo e_T ... i procjenjujemo e_{test} na osnovu:

$$e_\Delta \approx e_{test} \leq e_T + \sqrt{\frac{VC(H)(\log(2N/VC(H))+1)-\log(\eta/4)}{N}}$$

rbr	H_i	e_T	√ (VC(H)....	~e_{test}	Rang
1	H_1				4
2	H_2				1
3	H_3				1
4	H_4				1
5	H_5				5

VC-dimenzija + SRM – sažetak

- VC-dimenzija je mjera aproksimacijske snage nekog "stroja za učenje" – algoritma, izražena kroz ekspresivnost prostora hipoteza (funkcija) koji taj algoritam koristi;

- SRM: odabir algoritma koji ima minimalnu procjenu greške na novim primjerima

Trebalo bi zapamtiti:

- Shattering
- definiciju VC-dimenzije
- neke od primjera H i VC(H)
- SRM i čemu služi

-VC(H) =∞ ⇒ drugi pristupi ocjeni greške

- Efektivni VC
- unakrsna validacija

SRM i sposobnost generalizacije algoritma

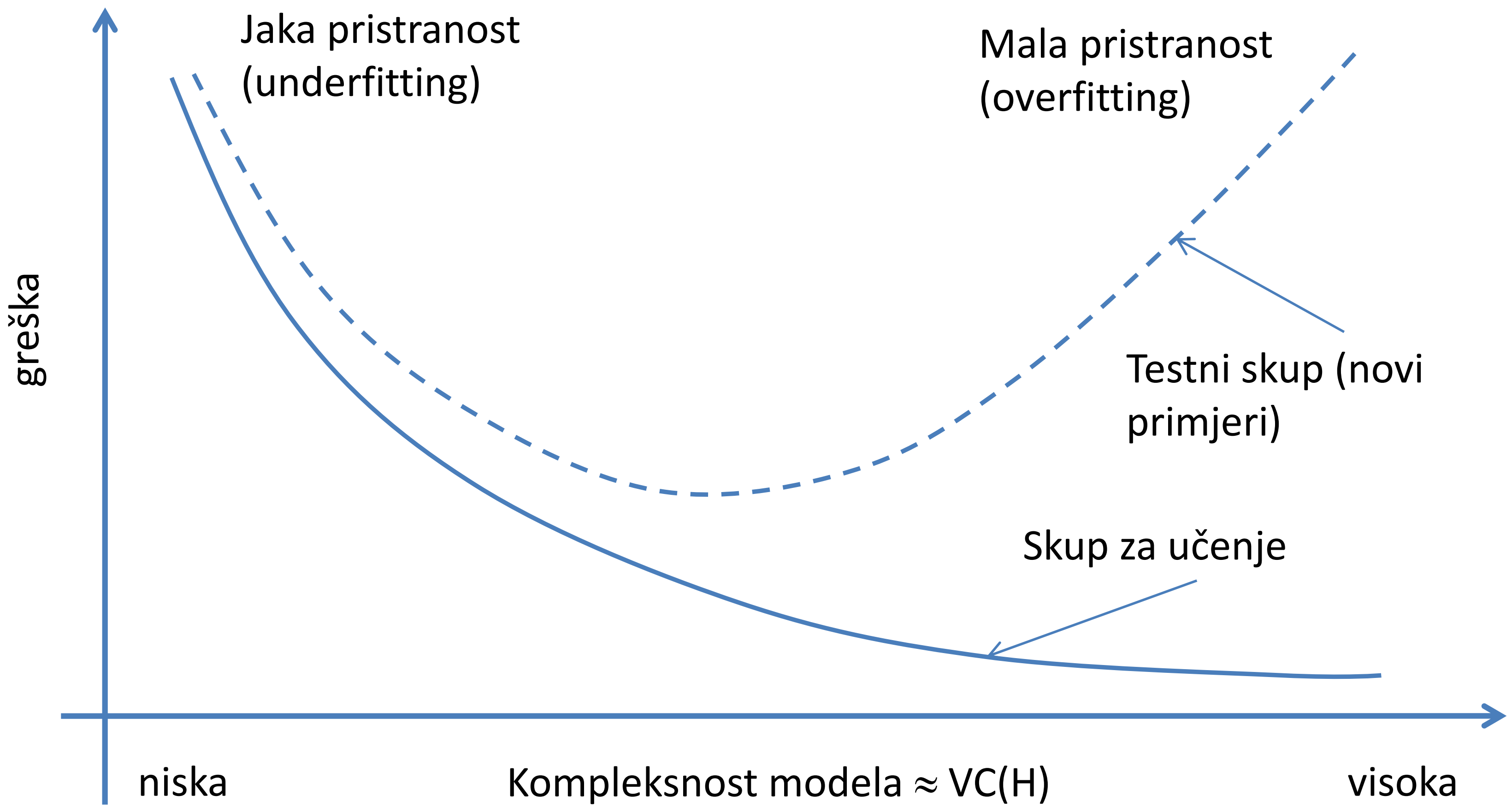
- **generalizacijom algoritma** možemo nazvati kvalitetu predikcije na novim (testnim) podacima

- naš osnovni cilj je dobiti dobra svojstva generalizacije naučenim modelom podataka

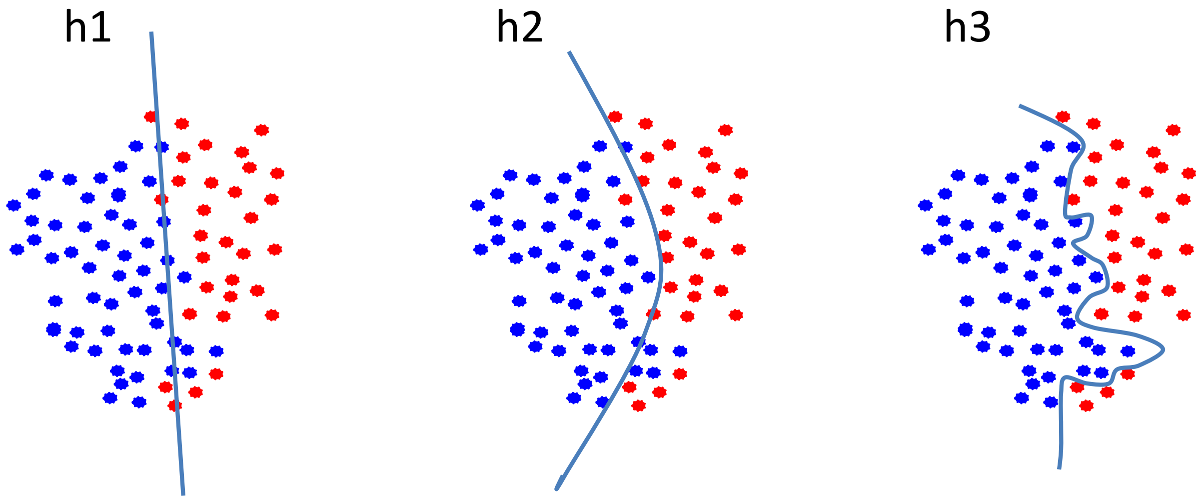
- kad je **model pre-kompleksan** za neki skup podataka – može se desiti da uči ili memorira dijelove "šuma" ili grešaka, pored stvarne strukture podataka – **pretreniranje (en. overfitting**, high variance)

- Nasuprot tome kad je naš **model nedovoljno kompleksan**, tada ne može naučiti (dobro aproksimirati) stvarnu strukturu podataka, bez obzira na njihovu količinu – **pristranost modela (en. underfitting**, high model **bias**)

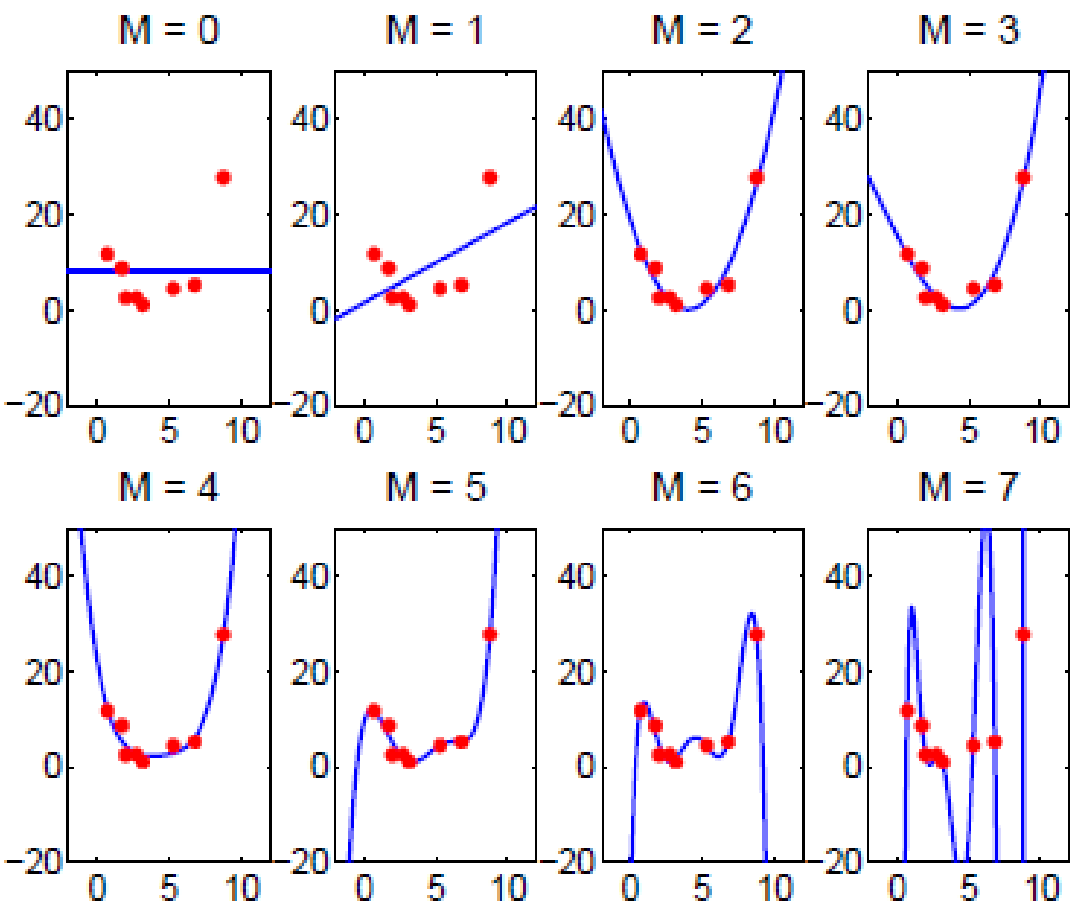
Tipično ponašanje



Primjer - klasifikacija



Primjer - regresija



Slijedeća predavanja

- tehnike evaluacije modela, bias & variance;
- metrike u ocjenjivanju modela

- struktura i klasifikacija algoritama strojnog učenja