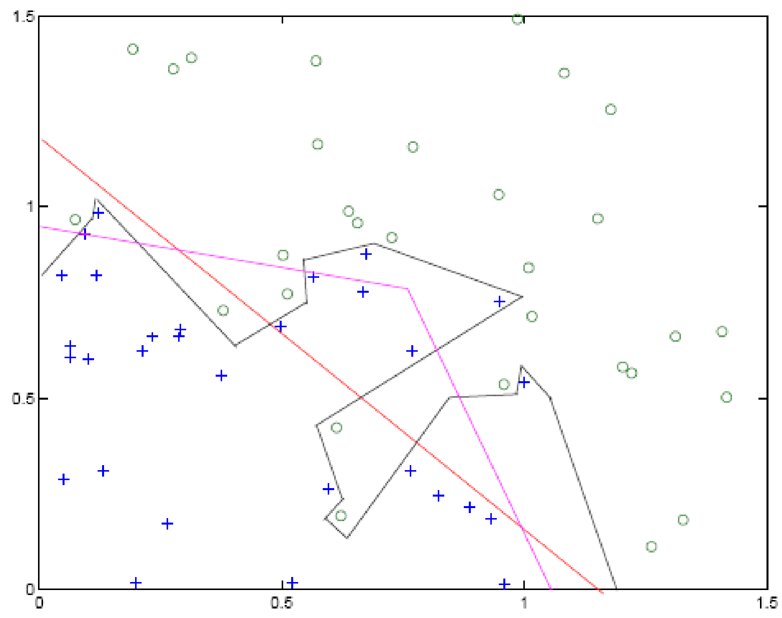
Strojno učenje
2

Tomislav Šmuc

Teorija (računalnog) strojnog učenja (TSU)

COmputational Learning Theory (COLT)

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



Literatura:

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

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.

(COLT) daje kvantitativne granice na pitanja vezana uz učenje na osnovu primjera

- u zavisnosti o svojstvima problema

  - ❑ Veličini i kompleksnosti prostora hipoteza/modela
  - ❑ Točnosti do koje želimo aproksimirati ciljni koncept
  - ❑ Vjerojatnosti da će algoritam naučiti uspješnu hipotezu
  - ❑ Načinu kako su primjeri prezentirani "učeniku"
    - ❑ Slučajno, od strane tutora, na "traženje učenika" ...

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

$$\text{Tražimo } h \text{ takav da vrijedi:}$$

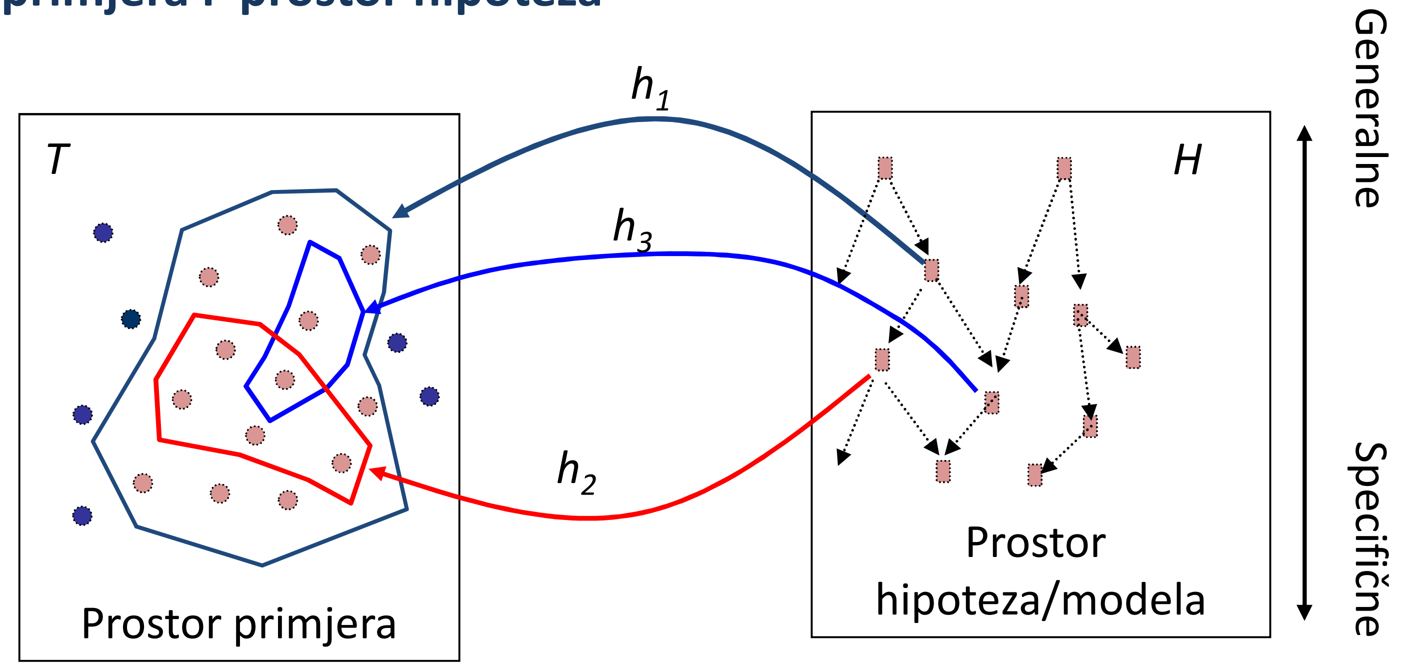
$$(\forall \langle x_i, f(x_i) \rangle \in T) \quad (B \wedge h \wedge x_i) \vdash f(x_i)$$

- *h* – je hipoteza(model) koja reprezentira/aproksimira ciljni koncept *c(=f(**x**)),* u idealnom slučaju – *h(**x**)=f(**x**).*
- 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.***

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 >*

Induktivno učenje – učenje na osnovu skupa primjera

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 s igranjem tenisa

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

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

- *H* – prostor hipoteza/modela – konjunkcija uvjeta na vrijednosti atribute/varijable **x** (npr. x_1 = sunčano/oblačno/kiša/#)
- Ciljni koncept *c*: **X**⟶y
- *Δ* stvarna i kompletna distribucija svih primjera **X** (***T*** $\subseteq \Delta$)

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*

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

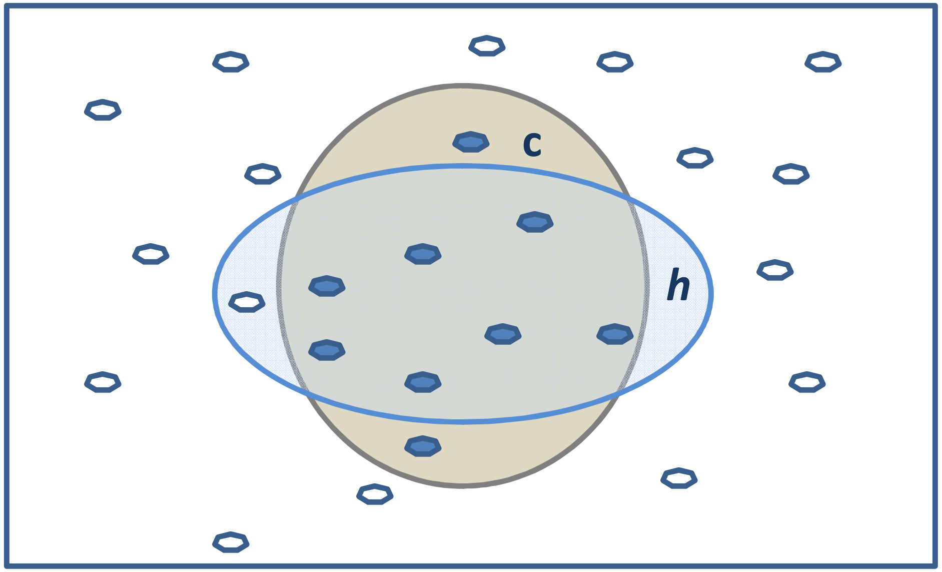
Skup primjera

Distribucija vjerojatnosti

Dva viđenja greške pri induktivnom učenju

Možemo li predvidjeti stvarnu grešku na osnovu izmjerene greške na dostupnom skupu primjera ?

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* duljine *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 (preko velike pogreške), 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 *:*

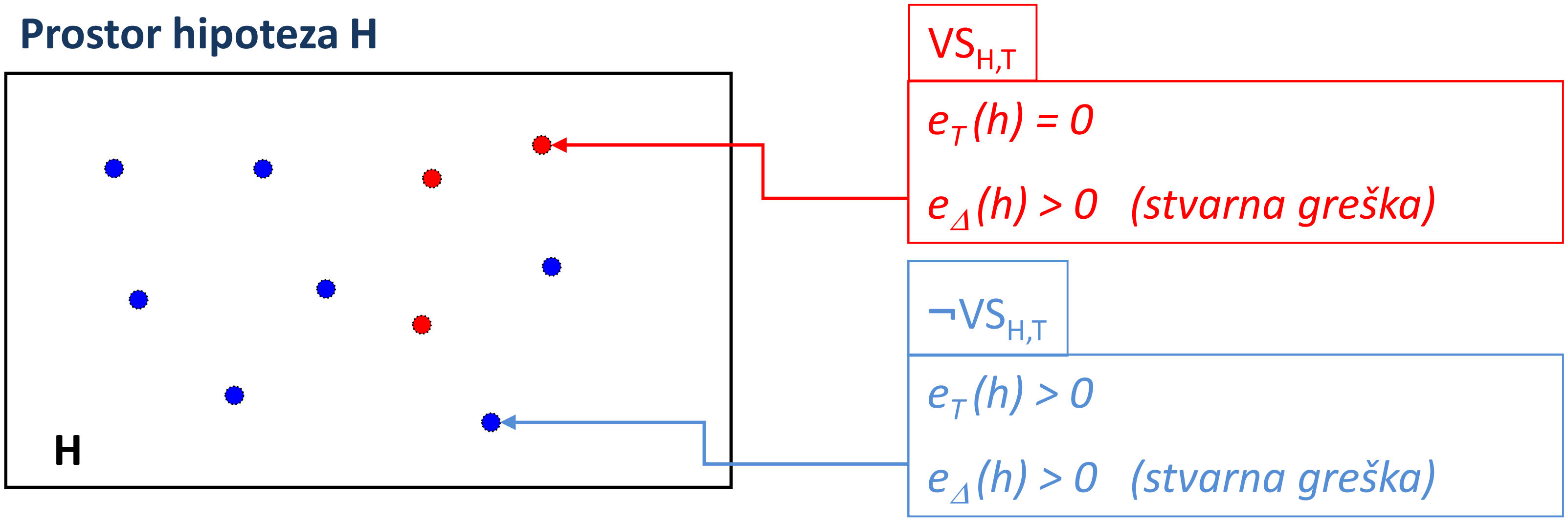
$$VS_{H,T} \equiv \{h \in H \mid Konzistentna\ (h,T)\}$$

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 $VS_{H,T}$)

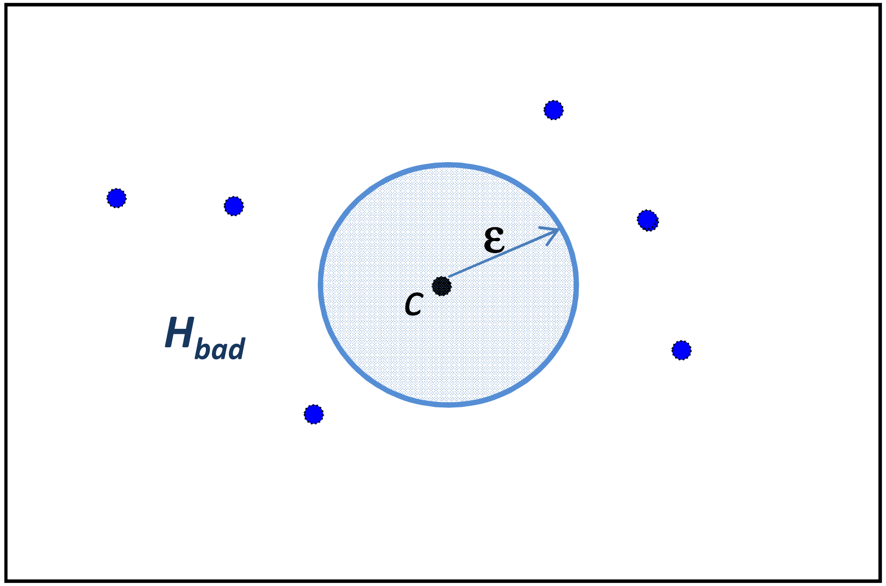
Prostor hipoteza H



$VS_{H,T}$ je ε - iscrpiv/kompletnost (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 :

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

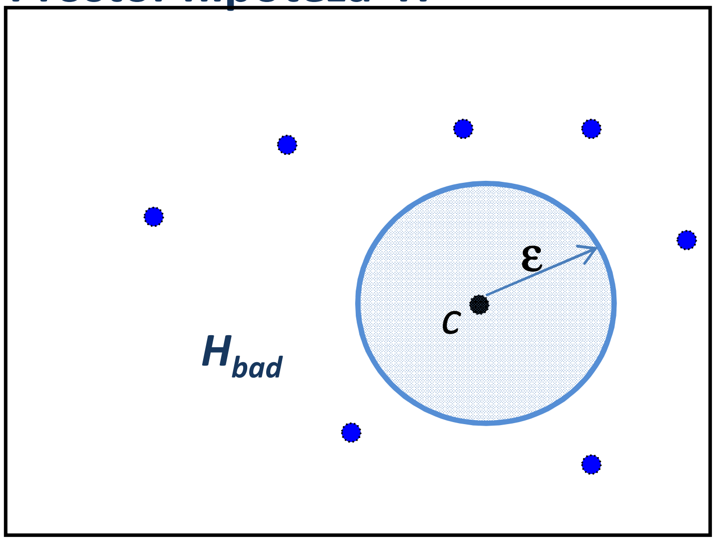
Za N novih primjer x_i iz Δ *vrijedi:*

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

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

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

Prostor hipoteza H



Želimo da ova vjerojatnost bude što manja:

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

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

S obzirom da vrijedi: $1-\varepsilon \le e^{-\varepsilon}$

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

ovu ćemo vjerojatnost δ postići nakon učenja na N primjera :

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

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

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

- Brojem *N* zapravo označavamo kompleksnost prostora hipoteza

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

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

- Za prostor primjera s *n* 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 *).

  Tada vrijedi

  $|H|=3^n$

  pa je broj potrebnih primjera:

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

Za ε=0.05; δ=0.01

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

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 ?

|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 ?
  - Ustvari 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 postaviti pitanje koliko nam promjera treba:

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

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

Napomena: ε je sada samo razlika između $e_{\Delta}(h)$ i $e_T(h)$
- tj. mjera overfitting-a!

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 kad |H| → ∞

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!)

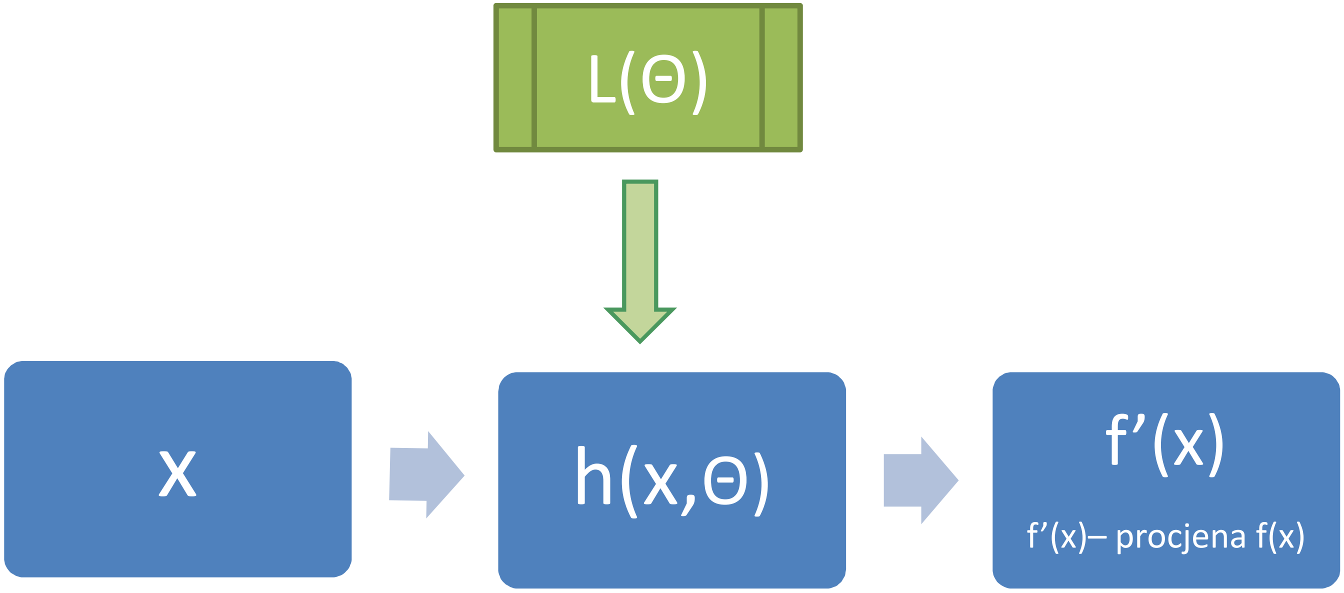
Shattering => Sposobnost particioniranja skupa primjera od strane nekog prostora hipoteza H
(en. shattering; hr.drobljenje, razbijanje)

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)≡ ∞je najveća vrijednost N skupa S koja može biti **particionirana** skupom hipoteza H.

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

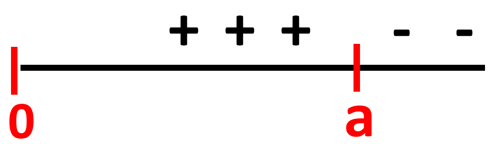
h(x,Θ) **predstavlja neku funkciju koju možemo naučiti algoritmom** ***L***



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

Polu-intervali:

$h(x, \Theta) \in H$; H - intervali tipa [0,a), za neki realni a>0



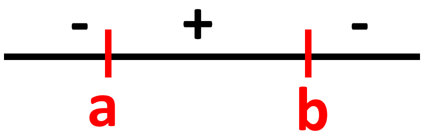
$VC(h(x, \Theta)) = ?$

$|H| = ?$

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

Intervali

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



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

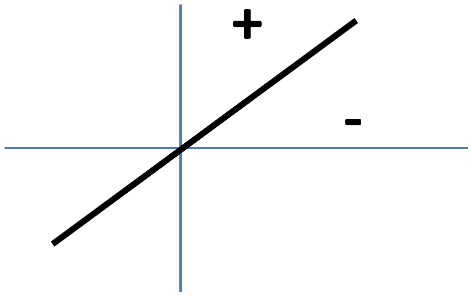
$|H| = ?$

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

Poluprostori u ravnini

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

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



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

$|H| = ?$

VC dimenzija prostora hipoteza H na prostoru primjera **X** je veličina najvećeg konačnog podskupa **x** koji se još može rastaviti hipotezama iz **H**

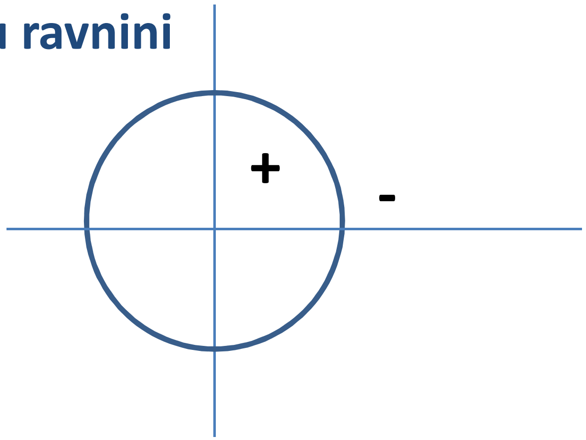
Ako postoji podskup veličine **d** koji se može rastaviti, tada vrijedi - VC(H) >=d
Ako se nijedan podskup veličine **d** ne može rastaviti, tada vrijedi - VC(H) < d

<u>VC(Poluintervali) = 1</u> (nijedan podskup veličine **2** se ne može rastaviti)
<u>VC(Intervali) = 2</u> (nijedan podskup veličine **3** se ne može rastaviti)
<u>VC(Poluprostori u ravnini) = 3</u> (nijedan podskup veličine **4** se ne može rastaviti)

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

$h(x, \Theta) \in H$; – kružnice u ravnini

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



....

- VC(sin(x))
- VC(stabla odlučivanja)
- VC(perceptron)
- VC(neuralne mreže)

Gornja granica broja primjera

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

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

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 "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)....	$\sim e_{test}$	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 informacija o aproksimacijskoj snazi 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

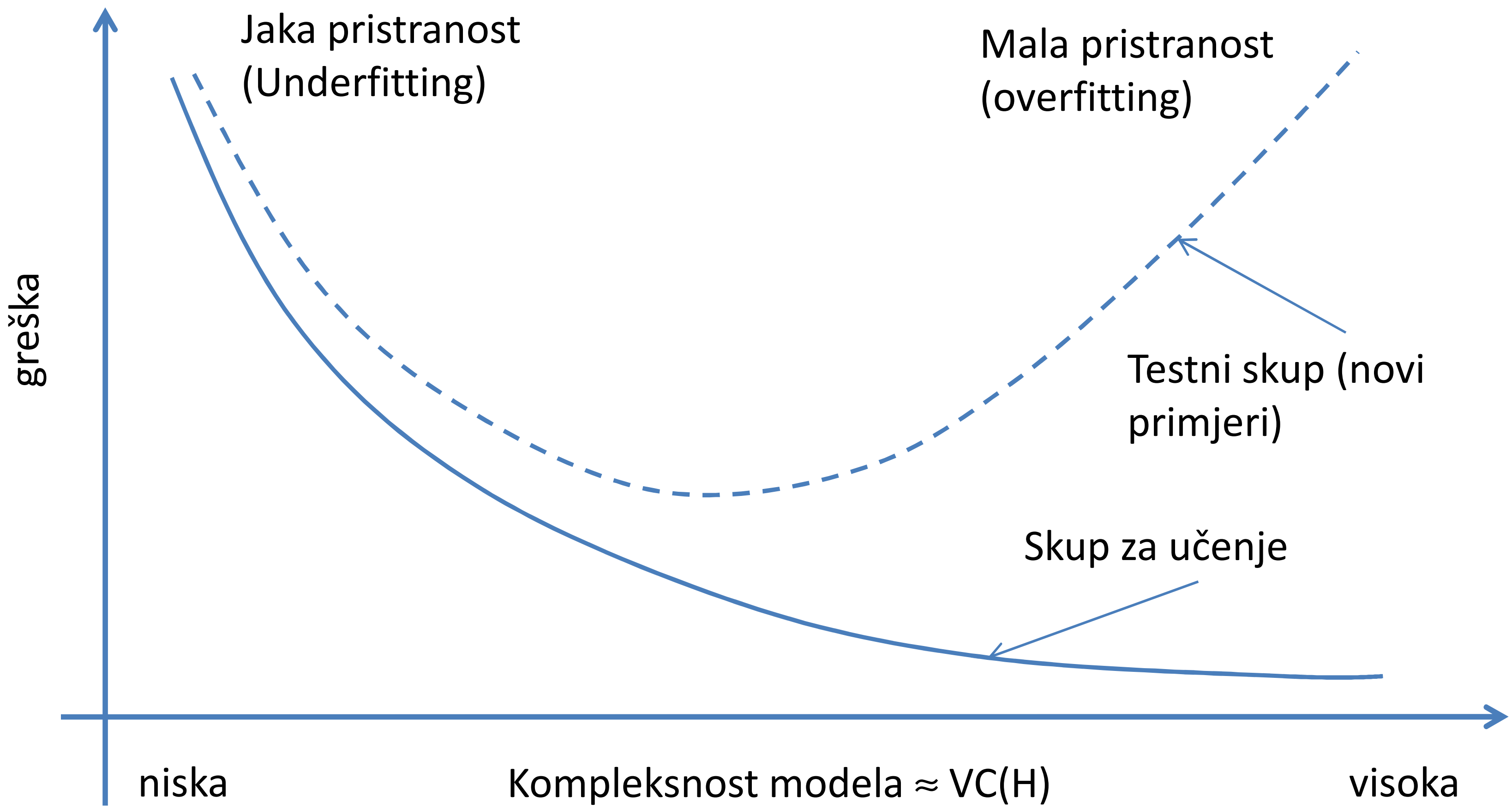
Trebalo bi zapamtiti:

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

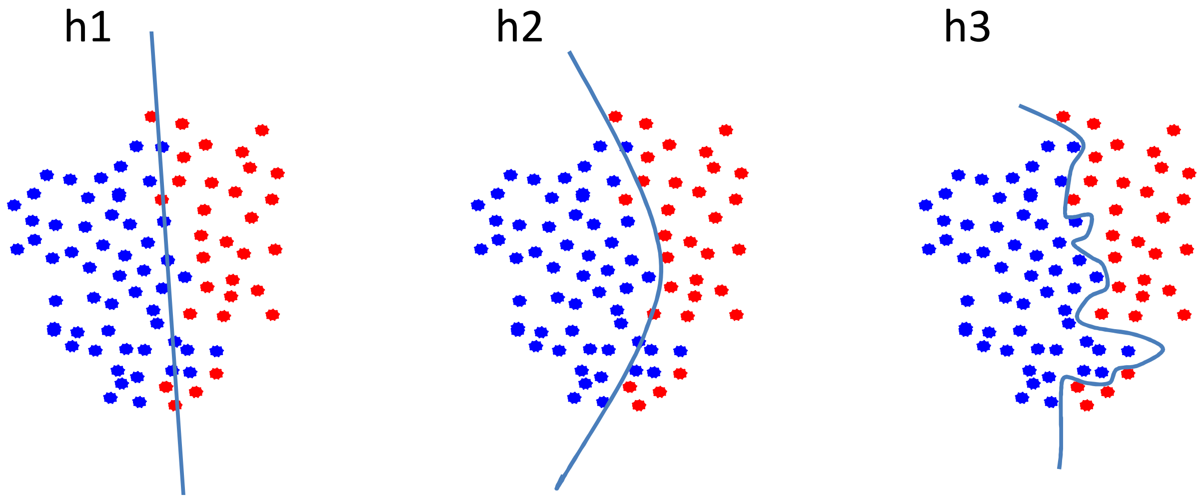
SRM i sposobnost generalizacije algoritma

- generalizacijom algoritma možemo nazvati kvalitetu predikcije na novim (testnim) podacima
- naš osnovni cilj je dobiti dobra svojstva generalizacije naučenim modelom podataka
- kad je naš model pre-kompleksan za neki skup podataka – može se desiti da uči ili memorira dijelove "šuma" ili grešaka, pored stvarne strukture podataka – pretreniranje (overfitting, model 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, model bias)

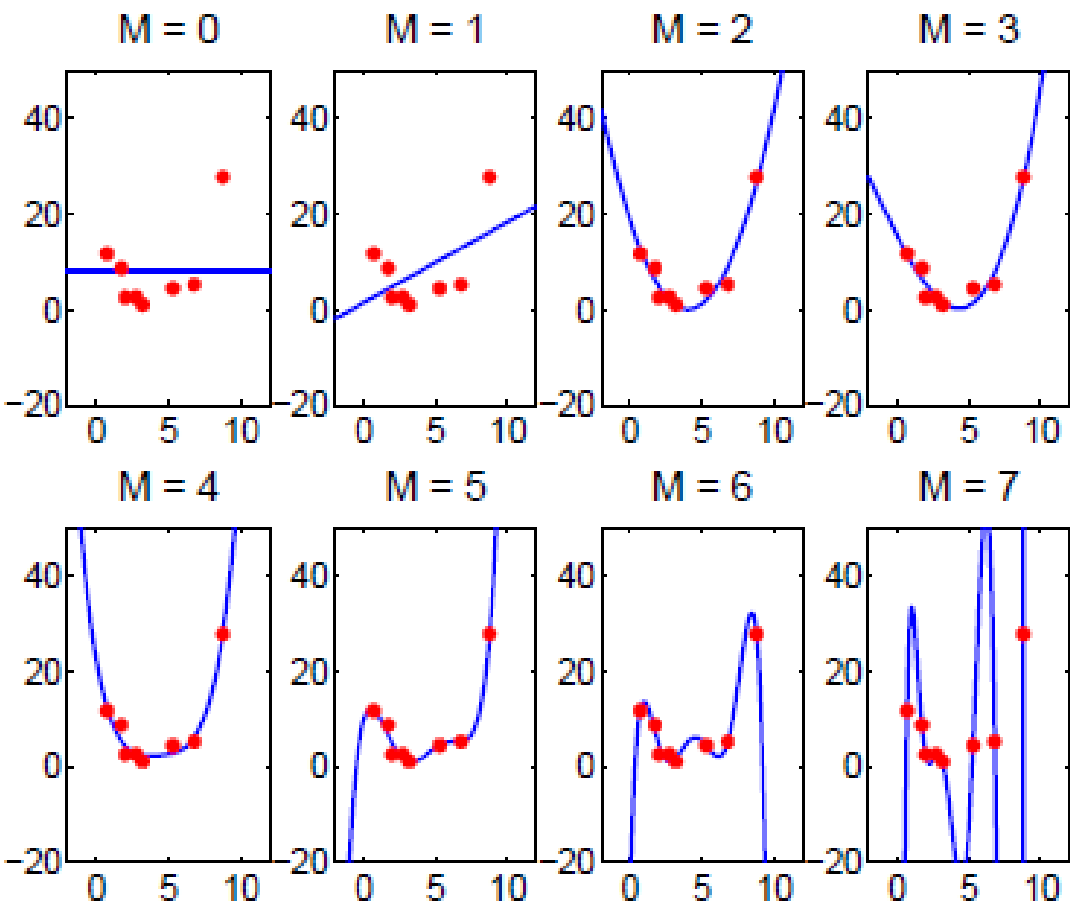
Tipično ponašanje



Primjer - klasifikacija



Primjer - regresija



Drugi put

Nastavak priče:

- tehnike evaluacije modela;
- metrike u ocjenjivanju modela