IN550 Machine Learning

Approssimazione universale e kernel

Vincenzo Bonifaci

Feature e basi di funzioni

Parlando di regressione polinomiale abbiamo visto l'utilità di introdurre *feature* non lineari rispetto ai dati di input

Ad esempio, una regressione cubica

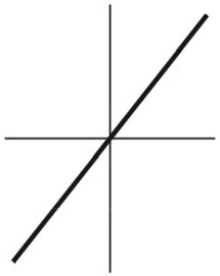
$$h(x) = w_3 x^3 + w_2 x^2 + w_1 x + w_0 \quad (x \in \mathbb{R}^1)$$

può essere ricondotta ad una regressione lineare introducendo il *vettore delle feature* $\phi(x) = (1, x, x^2, x^3)$:

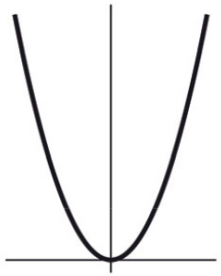
$$h(x) = w_3\phi_3 + w_2\phi_2 + w_1\phi_1 + w_0\phi_0 = w^\top \phi$$

$$\phi(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^4$$

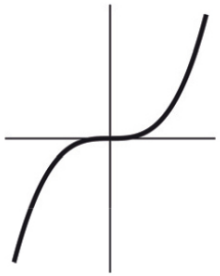
$\{1, x, x^2, x^3\}$ può essere vista come una *base di funzioni*



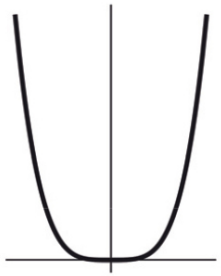
$f(x) = x$



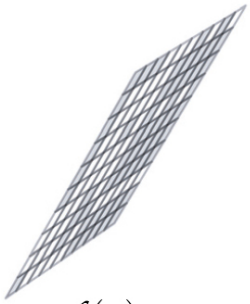
$f(x) = x^2$



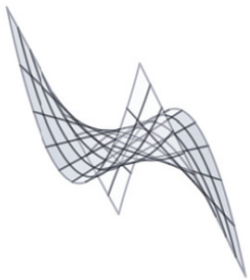
$f(x) = x^3$



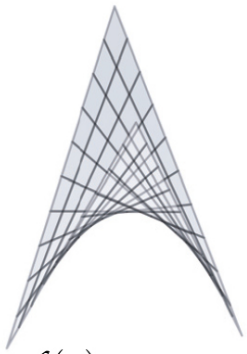
$f(x) = x^4$



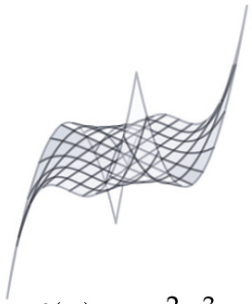
$f(\mathbf{x}) = x_2$



$f(\mathbf{x}) = x_1 x_2^2$



$f(\mathbf{x}) = x_1 x_2$



$f(\mathbf{x}) = x_1^2 x_2^3$

Combinando "unità" polinomiali $f_1(x) = x, \quad f_2(x) = x^2, \quad f_3(x) = x^3, \ldots$ possiamo cercare di *approssimare* funzioni arbitrarie

$$y(x) \approx w_0 + w_1 f_1(x) + w_2 f_2(x) + \ldots + w_B f_B(x)$$

Approssimazione universale

La base di funzioni $\{1, x, x^2, \ldots, x^k, \ldots\}$ ha interessanti caratteristiche:

- Ciascuna "unità" (monomio) ha una *forma fissa*: non ha nessun parametro "interno"
- Esistono infinite unità possibili:

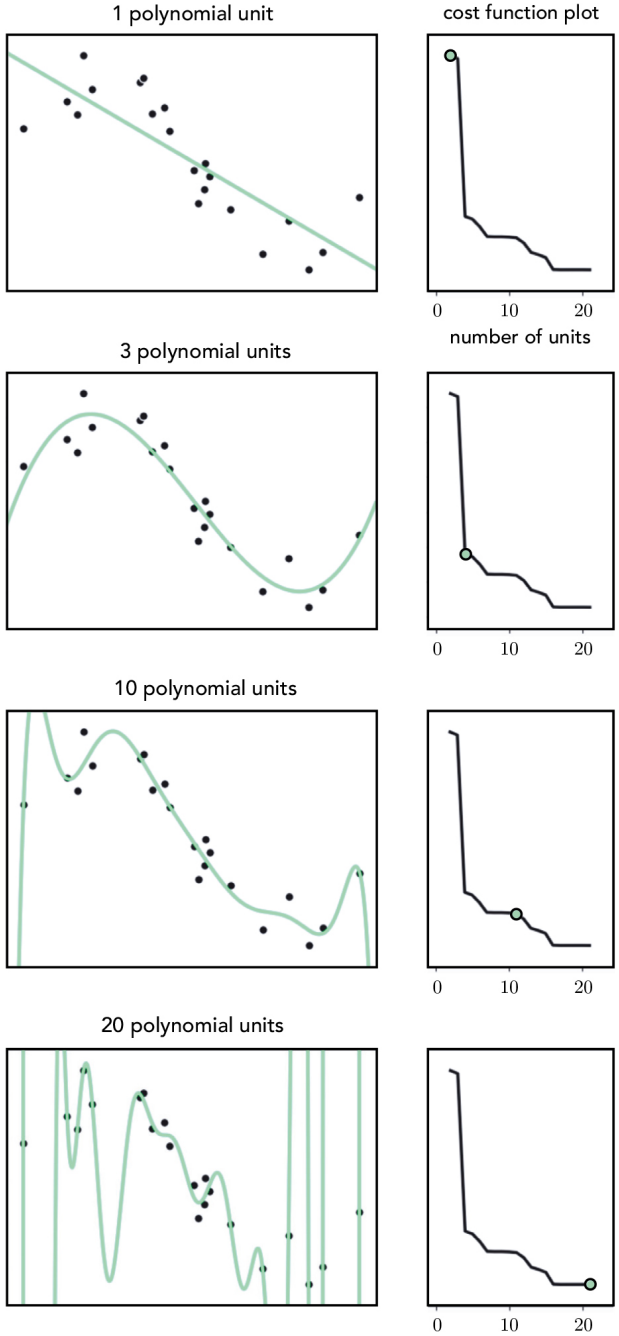
$$f_k(x) = x^k, \qquad x \in \mathbb{R}^1$$

Nel caso di input d-dimensionali,

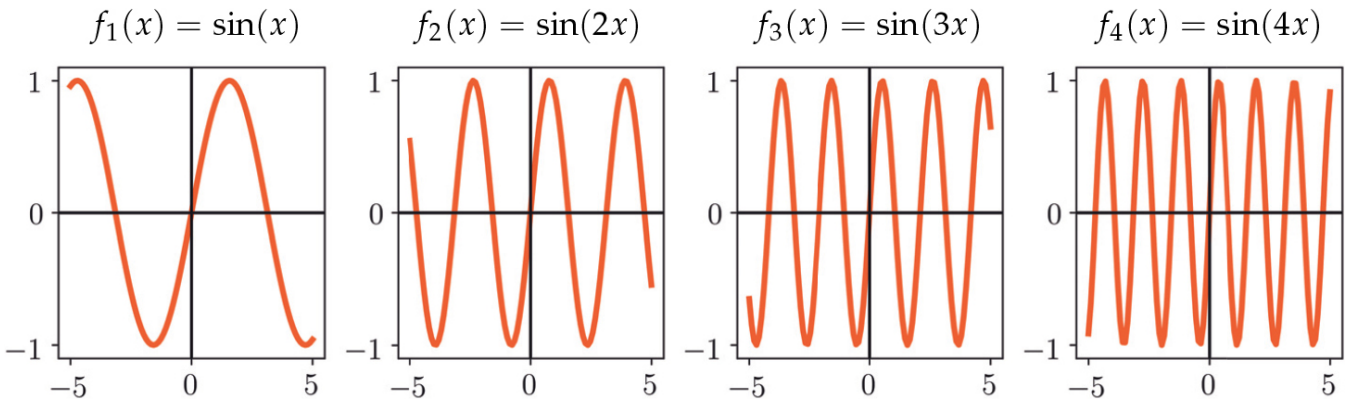
$$f_k(x) = x_1^{k_1} x_2^{k_2} \ldots x_d^{k_d}, \qquad x \in \mathbb{R}^d$$

- Sufficienti unità possono approssimare in maniera arbitrariamente precisa qualunque funzione continua
(vedi *teorema di approssimazione di Weierstrass*)

$\Rightarrow$ I polinomi sono un esempio di *approssimatori universali* (a forma fissa)


1 polynomial unit
cost function plot
0
10
20
3 polynomial units
number of units
0
10
20
10 polynomial units
0
10
20
20 polynomial units
0
10
20

Approssimatori di Fourier



Un altro esempio di approssimatori universali a forma fissa è dato dalla *base di Fourier*:

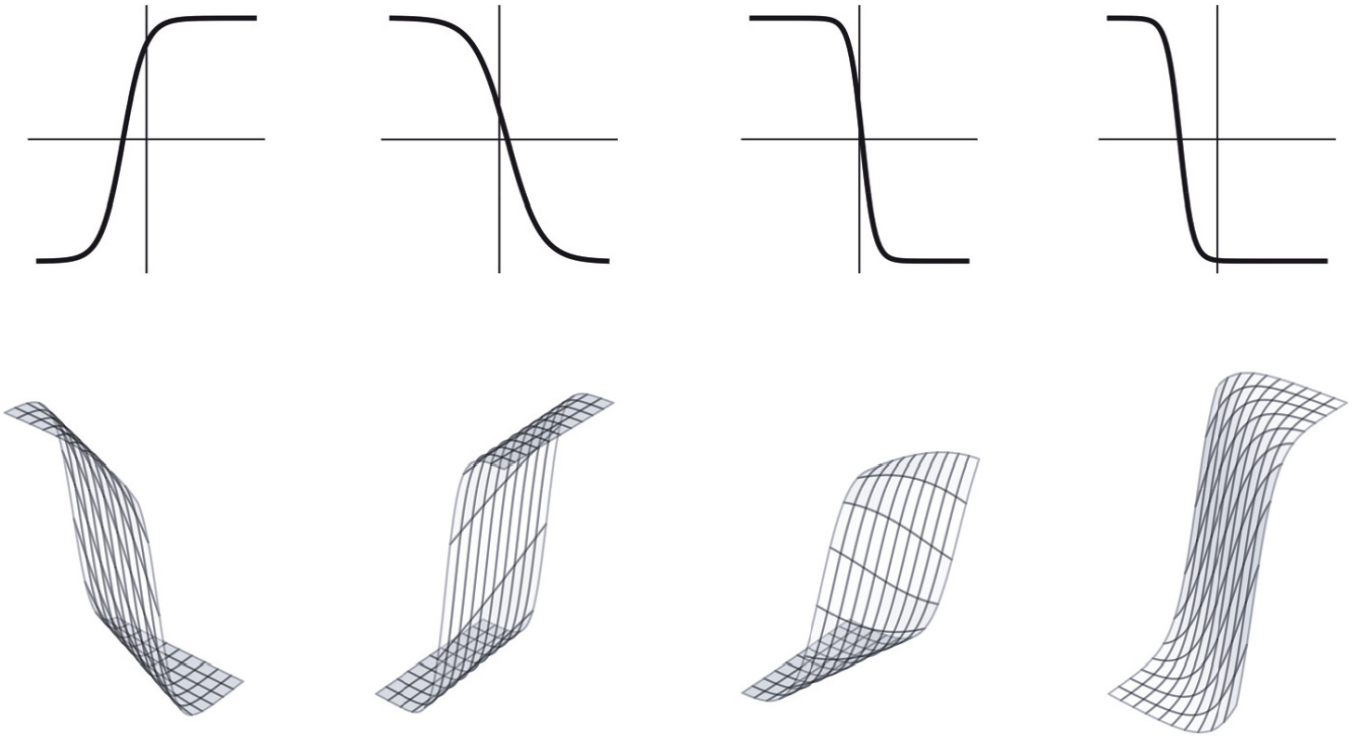
$$f_{2k-1}(x) = \sin(2\pi k x) \qquad x \in \mathbb{R}^1$$
$$f_{2k}(x) = \cos(2\pi k x)$$

Tale base può essere estesa al caso di d dimensioni ($x \in \mathbb{R}^d$):

$$f_k(x) = \exp(2\pi i k_1 x_1) \exp(2\pi i k_2 x_2) \ldots \exp(2\pi i k_d x_d) = \exp(2\pi k^\top x)$$

Approssimatori neurali

Anche i neuroni artificiali possono essere visti come degli approssimatori universali, ma a *forma variabile* (ogni unità ha dei parametri interni)



$$f_k(x) = \tanh(w_{k,0} + w_{k,1}x) \qquad x \in \mathbb{R}^1$$

$$f_k(x) = \tanh(w_{k,0} + w_{k,1}x_1 + \ldots + w_{k,d}x_d) \qquad x \in \mathbb{R}^d$$

Elevato grado di approssimazione: difficoltà

Per ottenere un elevato grado di approssimazione, è necessario usare una famiglia di approssimatori altamente rappresentativa

Es.: tutti i monomi di grado $\leq D$, con D grande

Questo porta a due difficoltà:

- La varianza del modello aumenta
- La complessità computazionale dell'apprendimento aumenta

Esempi

Il numero di parametri di un modello polinomiale di grado totale D per un'input d-dimensionale è

$$n = \binom{d+D}{D} = \frac{(d+D)!}{d!D!}$$

Il numero di parametri di un modello di Fourier di grado D è

$$n = (2D+1)^d$$

NB. Le formule nel libro di testo non conteggiano i parametri di offset e quindi differiscono di 1.

Elevato grado di approssimazione: difficoltà

La varianza può essere controllata:

- aumentando il numero di esempi nel training set
- utilizzando tecniche di regolarizzazione

Per combattere l'esplosione combinatoria si introduce invece il concetto di *kernelizzazione*

- Permette di lavorare nello spazio delle feature in maniera implicita
- Fornisce un guadagno computazionale quando n (numero di feature) è più grande di m (numero di esempi)

Feature map e spazio delle feature

Spazio di Hilbert

Uno *spazio di Hilbert* è uno spazio vettoriale (completo) dotato di un prodotto interno $\langle a, b \rangle$.

Feature map e spazio delle feature

Sia $\mathcal{X}$ lo spazio degli input. Una *feature map* è una funzione

$$\phi : \mathcal{X} \to \mathcal{F}$$

dove $\mathcal{F}$ è uno spazio di Hilbert. $\mathcal{F}$ è detto *spazio delle feature*.

Spesso (ma non per forza), $\mathcal{F} \equiv \mathbb{R}^n$ per qualche n
$\mathcal{F}$ può essere anche infinito dimensionale (!)

Kernel

L'osservazione cruciale (vedi oltre) è che molti metodi di apprendimento aggiornano i parametri solo in base al valore di prodotti interni della forma

$$\langle \phi(x^{(j)}), \phi(x^{(i)}) \rangle$$

Kernel di ϕ

Sia $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ la funzione definita da

$$K(x, x') \stackrel{\text{def}}{=} \langle \phi(x), \phi(x') \rangle$$

per tutti gli $x, x' \in \mathcal{X}$. K è chiamato il *kernel* di ϕ.

Se sappiamo calcolare $K(x, x')$ senza calcolare $\phi(x)$ e $\phi(x')$, potremmo sperare in un guadagno computazionale

Esempio: Least Mean Squares

L'algoritmo di regressione Least Mean Squares, quando esamina l'esempio i-esimo, applica la regola di aggiornamento

$$w \leftarrow w - 2\eta(\langle w, \phi^{(i)} \rangle - y^{(i)})\phi^{(i)}$$

Per induzione, il vettore w apparterrà al sottospazio generato da

$$\{\phi^{(1)}, \phi^{(2)}, \ldots, \phi^{(m)}\}$$

quindi può essere scritto come $w = \sum_{j=1}^{m} \alpha_j \phi^{(j)}$ e una regola equivalente è

$$\alpha_i \leftarrow \alpha_i - 2\eta \left(\sum_{j=1}^{m} \alpha_j \langle \phi^{(j)}, \phi^{(i)} \rangle - y^{(i)} \right)$$

Se sapessimo calcolare il kernel, potremmo lavorare in $\mathbb{R}^m$ anziché $\mathbb{R}^n$

Teorema del rappresentante

Teorema del rappresentante [Representer theorem]

Sia dato un problema di ottimizzazione della forma

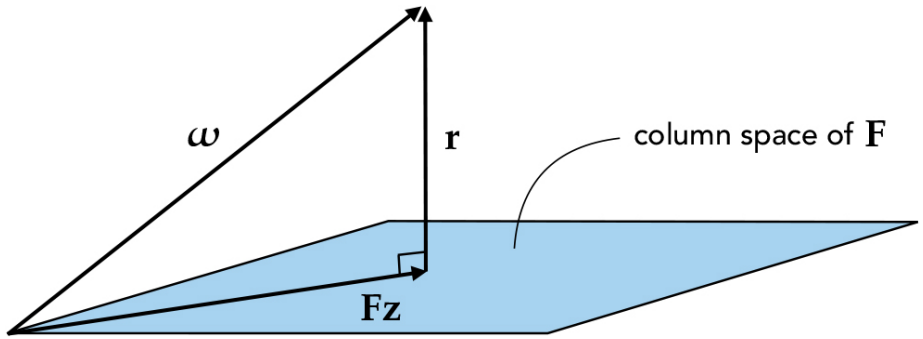
$$\underset{w}{\text{minimize}}\, g(\langle w, \phi^{(1)} \rangle, \ldots, \langle w, \phi^{(m)} \rangle) + R(\|w\|) \qquad (*)$$

con $g : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ arbitraria e $R : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ nondecrescente.

Allora esiste $\alpha \in \mathbb{R}^m$ tale che $\sum_{i=1}^m \alpha_i \phi^{(i)}$ è una soluzione ottima del problema.

Dimostreremo il teorema nel caso finito-dimensionale ($\mathcal{F} \equiv \mathbb{R}^n$)

Una semplice decomposizione vettoriale



Sia F una matrice $n \times m$ e $w^* \in \mathbb{R}^n$ qualunque

Possiamo sempre decomporre

$$w^* = Fz + r$$

dove r è ortogonale allo spazio generato dalle colonne di F

(ed r è nullo se e solo se w^* è nello spazio generato dalle colonne di F)

Dimostrazione del teorema del rappresentante

Sia w^* una soluzione ottima del problema di ottimizzazione $(*)$
Definiamo

$$F = \begin{pmatrix} \phi^{(1)} & \phi^{(2)} & \dots & \phi^{(m)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times m}$$

Applichiamo la decomposizione $w^* = F\alpha + r = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \phi^{(i)} + r$

Considerando $w \stackrel{\text{def}}{=} w^* - r$, osserviamo:

- $\langle r, \phi^{(i)} \rangle = 0$
- $\|w^*\|^2 = \|w\|^2 + \|r\|^2 \geq \|w\|^2$
- $R(\|w^*\|) \geq R(\|w\|)$
- $\langle w, \phi^{(i)} \rangle = \langle w^* - r, \phi^{(i)} \rangle = \langle w^*, \phi^{(i)} \rangle$

Quindi anche w è una soluzione ottima del problema, e soddisfa $w = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \phi^{(i)}$.

Esempi di metodi "kernelizzati"

- Kernel Nearest Neighbor
- Kernel Least Mean Squares
- Kernel Ridge Regression
- Kernel Perceptron
- Kernel Support Vector Machines
- Kernel Principal Component Analysis

Esempio di kernel: kernel polinomiale

$$x = \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \qquad \phi(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2}x_1 \\ \sqrt{2}x_2 \\ x_1^2 \\ \sqrt{2}x_1x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} K(u,v) &= \phi(u)^\top \phi(v) \\ &= 1 + 2u_1v_1 + 2u_2v_2 + u_1^2v_1^2 + 2u_1u_2v_1v_2 + u_2^2v_2^2 \\ &= (1 + u_1v_1 + u_2v_2)^2 \\ &= (u^\top v)^2. \end{aligned}$$

Per una feature map polinomiale di grado D: $K(u,v) = (u^\top v)^D$

Esempio di kernel: kernel di Fourier

$$\phi(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2}\cos(2\pi x) \\ \sqrt{2}\sin(2\pi x) \\ \dots \\ \sqrt{2}\cos(2\pi D x) \\ \sqrt{2}\sin(2\pi D x) \end{pmatrix}$$

Si può dimostrare (vedi libro di testo) che

$$K(u, v) = \frac{\sin\left((2D+1)\pi(u-v)\right)}{\sin(\pi(u-v))}$$

Esiste anche la variante d-dimensionale della formula

Kernel come misura di similarità/correlazione

Un kernel è (per certi versi) analogo ad una misura di similarità o di correlazione tra vettori di input:

- Se $\phi(x)$ e $\phi(x')$ sono vicini, ci aspettiamo che $K(x, x') = \langle \phi(x), \phi(x') \rangle$ sia grande
- Se $\phi(x)$ e $\phi(x')$ sono quasi ortogonali, ci aspettiamo che $K(x, x') = \langle \phi(x), \phi(x') \rangle$ sia piccolo

Possiamo costruire un kernel valido partendo da una misura di similarità?

Per esempio, esiste una feature map ϕ il cui kernel coincida con

$$\mathrm{RBF}(x, x') \stackrel{\text{def}}{=} \exp\left(-\beta \left\| x - x' \right\|^2\right) \qquad ?$$

(*Radial Basis Function* o *kernel gaussiano*; $\beta > 0$ è un iperparametro)

Caratterizzazione dei kernel validi

La risposta è data dal seguente teorema

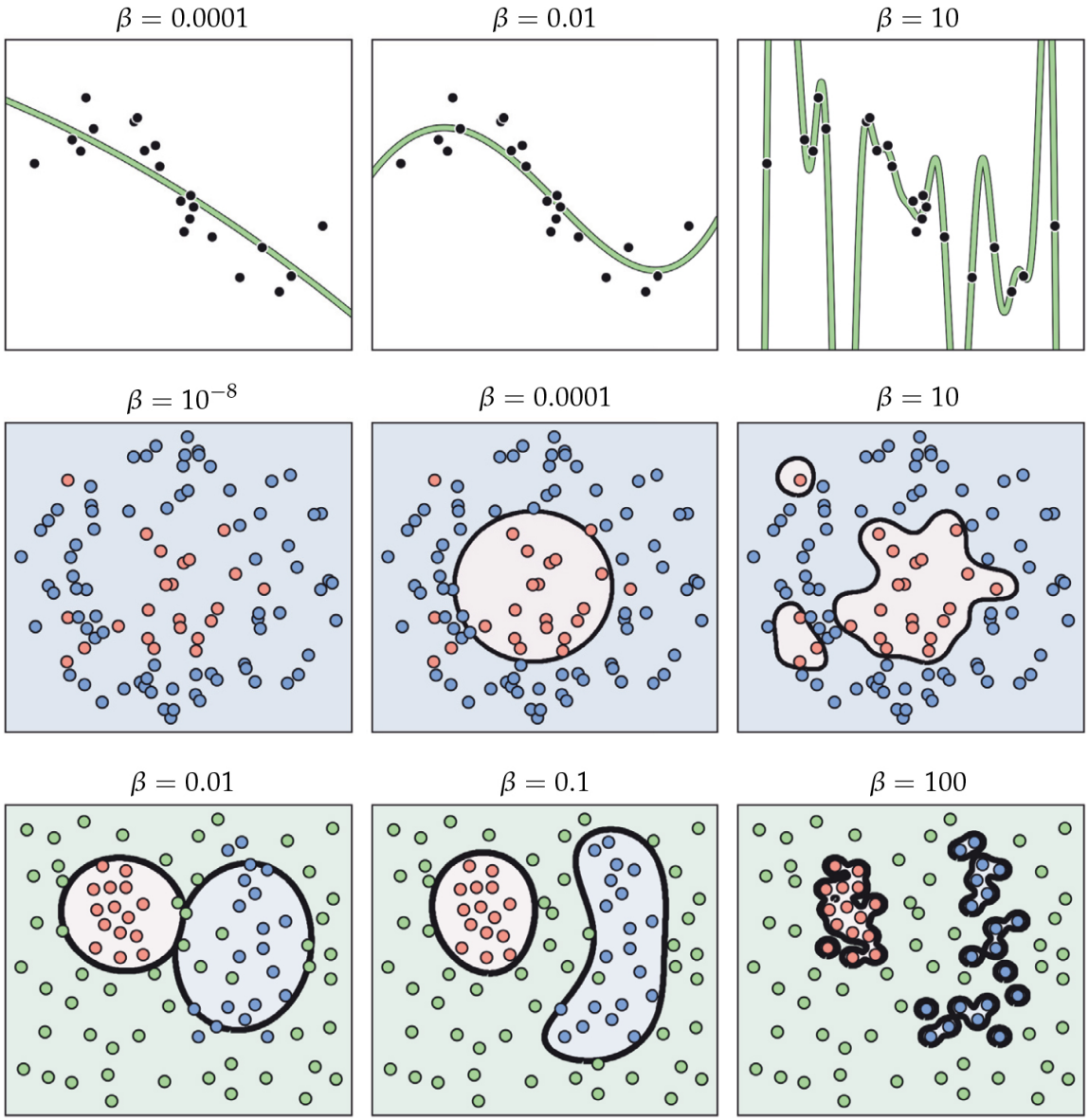
Teorema di Mercer

Sia $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ una funzione data. Allora K è un kernel valido se e solo se, per ogni m e ogni $x^{(1)}, \ldots, x^{(m)} \in \mathcal{X}$, la matrice $m \times m$

$$\mathrm{K} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} K(x^{(1)}, x^{(1)}) & K(x^{(1)}, x^{(2)}) & \ldots & K(x^{(1)}, x^{(m)}) \\ K(x^{(2)}, x^{(1)}) & K(x^{(2)}, x^{(2)}) & \ldots & K(x^{(2)}, x^{(m)}) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ K(x^{(m)}, x^{(1)}) & K(x^{(m)}, x^{(2)}) & \ldots & K(x^{(m)}, x^{(m)}) \end{pmatrix}$$

è simmetrica e semidefinita positiva ($\equiv$ ha tutti gli autovalori ≥ 0).

Ad esempio, per la Radial Basis Function, si dimostra che la condizione è soddisfatta; quindi la RBF è un kernel valido (con uno spazio delle feature $\mathcal{F}$ infinito-dimensionale, ma la cosa non è rilevante computazionalmente)



Esempi di regressione, classificazione binaria e classificazione multiclasse basate su Radial Basis Function con vari valori di β

Effettuare predizioni con un metodo kernelizzato

All'arrivo di un nuovo input x, per poter calcolare la predizione, qualunque sia l'algoritmo utilizzato occorrerà calcolare

$$K(x^{(i)}, x)$$

per ogni $x^{(i)}$ nel training set

In altri termini, per ogni singola predizione occorre confrontare x con tutti gli esempi nel training set (come succedeva in K-nearest neighbor)

Esempio: in una regressione lineare kernelizzata, la predizione sarà

$$\langle w, \phi(x) \rangle = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \langle \phi^{(i)}, \phi(x) \rangle = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i K(x^{(i)}, x)$$

Metodi kernelizzati in `scikit-learn`

Regressione ridge kernelizzata (`KernelRidge`)

Costo originale: $\frac{1}{m} \|Xw - y\|^2 + \lambda \|w\|^2$
Costo kernelizzato: $\frac{1}{m} \|\Phi\alpha - y\|^2 + \lambda \alpha^\top K \alpha$

Soft Support Vector Machine (`SVC`)

Costo originale: $C \sum_i \xi_i + \|w\|^2$ con $\xi_i = \max(0, 1 - y^{(i)} w^\top x^{(i)})$
Costo kernelizzato: $C \sum_i \xi_i + \alpha^\top K \alpha$ con $\xi_i = \max(0, 1 - y^{(i)} \alpha^\top K_i)$

Kernel disponibili:

- `linear`, `poly`, `rbf`, `sigmoid` o funzione definita dall'utente

Conclusione sui metodi kernelizzati

Vantaggi:

- Permettono di utilizzare un alto numero n di feature implicitamente
- La rappresentazione del modello è in $\mathbb{R}^m$ anziché $\mathbb{R}^n$ (conveniente se $m \ll n$)
- La funzione kernel è definibile dall'utente (deve soddisfare il criterio di Mercer)

Svantaggi:

- Ogni predizione richiede di scandire tutto il training set
- La rappresentazione del modello è in $\mathbb{R}^m$ anziché $\mathbb{R}^n$ (sconveniente se $m \gg n$)
- Non sempre $K(x, x')$ è calcolabile in modo efficiente; dipende dalla feature map ϕ

Altri esempi di kernel

- $k(x, x') = \tanh(a\langle x, x'\rangle + b)$ $(a, b \geq 0)$
- $k(x, x') = f(d(x, x'))$ dove d è una metrica su $\mathcal{X}$
- $k(x, x') = \frac{\langle x, x'\rangle}{\|x\|\|x'\|}$ (cosine similarity)
- $k(x, x') = \frac{|x \cap x'|}{|x \cup x'|}$ (Jaccard similarity)