

# Machine Learning 1

Henrik Tscherny

26. Dezember 2021

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Supervised learning</b>	<b>1</b>
1.1	Formal . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Disjunktive Normalformen (DNF'S)</b>	<b>3</b>
2.1	Formal . . . . .	4
2.2	Beweis der NP-hardness von set-cover . . . . .	5
<b>3</b>	<b>BTD's</b>	<b>7</b>
3.1	Formal . . . . .	7
3.2	NP-hard Beweis . . . . .	8

## 1 Supervised learning

Ziel: Finde in einer Funktionsfamilie, z.B. lineare Funktionen, eine Funktion z.B.  $f = 5x + 3$  welche eine gewichtete Summe über input-output-Paaren minimiert, dabei sollte die Funktion die gegebenen Daten bestmöglich beschreiben ohne dabei zu komplex zu sein

Beispiel:

- $g : \Theta \rightarrow Y^X$  -> Ordnet jeder Messung zu ob gesund oder krank

$$g_{\theta}(x_s) = \begin{cases} 0, & \sum_{j=1}^n \theta_j x_j > 0 \\ 1, & \text{sonnst} \end{cases}, \text{ für ein Sample } x_s \in \mathbb{R}^m$$

- $x \in X = \mathbb{R}^n$ : Inputs -> Messung mit m Messpunkten
- $y \in Y = \{0, 1\}$ : Labels -> gesund = 1, krank = 0

–  $\theta \in \Theta = \mathbb{R}^n$ : Parameter -> z.B. Koeffizienten einer linearen Funktion

Die Qualität einer gelernten Funktion kann u.a. durch folgende Größen beschrieben werden:

- **Accuracy** (Verhältnis der korrekten Voraussagen zur Gesamtanzahl)  

$$\frac{L(0,0)+L(1,1)}{|S|}$$
- **Error ratio** (Verhältnis der falschen Voraussagen zu Gesamtanzahl)  

$$\frac{L(0,1)+L(1,0)}{|S|}$$
- **Precision** (Von den positiv getesteten, wie viele sind tatsächlich positiv)  
 False-Positive-Rate  

$$\frac{L(1,1)}{L(1,0)+L(1,1)}$$
- **Recall/Sensitivity** (Von den tatsächlich positiven, wie viele wurden tatsächlich positiv getestet) False-Negative-Rate  

$$\frac{L(1,1)}{L(0,1)+L(1,1)}$$

## 1.1 Formal

Optimieren einer Funktionsfamilie  $g : \Theta \rightarrow \{0, 1\}^X$ , damit dies einfacher ist, optimieren einer Relaxation  $f : \Theta \rightarrow \mathbb{R}^X$ . Sei  $L$  eine Loss-function  $L : \mathbb{R} \times \{0, 1\} \rightarrow \mathbb{R}_0^+$  welche  $g$  im Bezug zu  $f$  definiert.

$$\forall \theta \in \Theta \forall x \in X : g_\theta(x) \in \underset{\hat{y} \in \{0,1\}}{\operatorname{argmin}} L(f_\theta(x), \hat{y})$$

Bsp. Loss-function:

$$\mathbf{0-1-Loss: } L = \begin{cases} 0, & \text{sample} = \text{label} \\ 1, & \text{sonnst} \end{cases}, \text{ der Loss ist 0\% wenn das Label stimmt}$$

Definiere des Weiteren:

- $S$ : Samples
- $X$ : Attributspace
- $x : S \rightarrow X$ : bildet ein konkretes Sample mit seinen Attributen ab
- $y : S \rightarrow \{0, 1\}$  gibt einem konkreten Sample ein Label

Das Tupel  $T = (S, X, x)$  nennt man **unlabeled data**

Das Tupel  $T = (S, X, x, y)$  nennt man **labeled data**

Damit die Komplexität der zu lernenden Funktion begrenzt wird, führen wir zusätzlich noch einen **Regularizer**. Komplexität kann in diesem Fall z.B. die Anzahl der Koeffizienten oder die Länge einer Formel bemessen werden. Der Einfluss des Regularizers wird durch einen Parameter  $\lambda$  gesteuert

$$R : \Theta \rightarrow \mathbb{R}_0^+ \text{ und } \lambda \in \mathbb{R}_0^+$$

Das **supervised learning problem** kann dann wie folgt formuliert werden:

$$\inf_{\theta \in \Theta} \lambda R(\theta) + \frac{1}{|S|} \sum_{s \in S} L(f_\theta(x_s), y_s)$$

- der Regularizer wird durch  $\lambda$  gewichtet
- es wird die Summe der individuellen Loss-Werte minimiert
- die Loss-Summe wird über die Anzahl der Samples Normalisiert, das macht man, damit man lediglich die Parameter übertragen muss, wenn man das Model weitergibt
- Da der Regularizer zum Gesamtloss addiert wird, wird versucht diesen Term ebenfalls möglichst klein zu halten

Das **separation problem** ist definiert durch:

$$\inf_{\theta \in \Theta} R(\theta) \\ \forall s \in S : f_\theta(x_s) = y_s$$

- finden des minimalen Regularizers
- alle Daten sind korrekt gelabeled

Das **bounded separability problem** lautet:

$$R(\theta) \leq m \\ \forall s \in S : f_\theta(x_s) = y_s$$

- finden eines Regularizers welcher die Komplexität für jeden Parameter unter einer Schranke m hält

Das **inference problem** (Anwenden des trainierten Modells) kann nun wie folgt formuliert werden:

$$\min_{y' \in \{0,1\}^S} \sum_{s \in S} L(\hat{f}(x_s), y'_s) = \sum_{s \in S} \min_{y' \in \{0,1\}^S} L(\hat{f}(x_s), y'_s)$$

## 2 Disjunktive Normalformen (DNF'S)

Probleme können ebenfalls als logische Gleichungen interpretiert werden, diese Gleichungen können dann in eine DNF (Mit oder verbundene und-Terme) umgeformt werden.

## 2.1 Formal

- $\Gamma = \{(V_0, V_1) \in 2^V \times 2^V \mid V_0 \cap V_1 = \emptyset\}$

Jede Variable kann entweder negiert oder nicht-negiert vorkommen

- $\Theta = 2^\Gamma$

- $\forall x \in \{0, 1\}^V : f_\theta(x) = \bigwedge_{(V_0, V_1) \in \theta} \prod_{v \in V_0} (1 - x_v) \prod_{v \in V_1} x_v$

Definition einer DNF, verordnete negierte und nicht-negierte Variablen

**Beispiel**  $\{(\emptyset, \{v_1, v_2\}), (\{v_1\}, \{v_3\})\} = \theta \in \Theta \rightarrow f_\theta(x) = x_{v_1} x_{v_2} \vee (1 - x_{v_1}) x_{v_3}$

Des Weiteren können Regularizer für DNF's definiert wenn, um deren Komplexität zu bemessen:

- $R_d(\theta) = \max_{(V_0, V_1) \in \theta} (|V_0| + |V_1|)$

Tiefe der Formel, e.g. Anzahl der Variablen des längsten und-Terms

- $R_l(\theta) = \sum_{(V_0, V_1) \in \theta} (|V_0| + |V_1|)$

Länge der Formel, e.g. Gesamtanzahl der Variablen in der Gesamtformel (auch doppelte zählen)

**Beispiel**  $\theta = \{(\emptyset, \{0\}), (\{0\}, \{3\}), (\{0, 3\}, \{1, 2\})\}$

$\rightarrow f_\theta(x) = x_0 \vee (1 - x_0)x_3 \vee (1 - x_0)(1 - x_3)x_1x_2 \rightarrow R_l(\theta) = 7, R_d(\theta) = 4$

Das **Supervised learning problem of DNF's** kann wie folgt formuliert werden:

$$\min_{\theta \in \Theta} R(\theta)$$

$$\forall s \in S : f_\theta(x_s) = y_s$$

- Der Unterschied ist lediglich, dass ein min statt eines inf benutzt wird
- min: kleinstes Element einer Menge und muss in der Menge selbst liegen
- inf: größte untere Schranke, muss nicht in der Menge selbst liegen, es müssen nur alle Elemente kleiner sein Des Weiteren erhält man das **bounded depth/length DNF Problem** indem man den Regularizer aus dem bounded sparability problem mit  $R_d/R_l$  austauscht

### Das bounded length/depth DNF problem ist NP-hard

Beweis durch Reduktion des set cover problems auf das bounded length/depth DNF problem (Haussler):

Was ist ein Set-Cover:

- Sei  $S$  eine Menge
- Sei  $\Sigma \subseteq 2^S$ ,  $\emptyset \notin \Sigma$  ein Cover, gdw.  $\bigcup_{U \in \Sigma} U = S$
- $m \in \mathbb{N}$
- Die Entscheidung ob ein  $\Sigma' \subseteq \Sigma$  existiert, s.d.  $|\Sigma'| \leq m$  nennt man das **set cover problem**  $(S, \Sigma, m)$

Beispiel:

Sei  $S = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ , dann ist ein mögliches Cover  $\Sigma = \{\{1, 2, 3\}, \{4, 5, 6\}\}$  ( $m=2$ )

## 2.2 Beweis der NP-hardness von set-cover

Wir zeigen das set-cover NP-hard ist indem wir es auf bounded length/depth DNF reduzieren (Haussler)

- Sei  $(S', \Sigma, m)$  eine Instanz von set-cover
  - Definiere nun **Haussler data**  $(S, X, x, y)$  s.d.:
    - $S = S' \cup \{1\}$ , wir fügen  $S$  ein spezielles distinktes Element **1** hinzu
    - $X = \{0, 1\}^\Sigma$
    - wir definieren uns eine Funktion welche angibt ob ein Element in einer Menge vorkommt wie folgt:
$$\forall s \in S' \forall \sigma \in \Sigma : x_s(\sigma) = \begin{cases} 0, & s \in \sigma \\ 1, & \text{otherwise} \end{cases}$$
- Beispiel:
- \*  $S = S' \cup \{1\} = \{2, 3\} \cup \{1\} = \{1, 2, 3\}$
  - \*  $\Sigma = \{\{2\}, \dots, \{1, 2\}, \dots, \{2, 3\}\}$
  - \*  $x_2(\{2, 3\}) = 0, x_3(\{2\}) = 1$
  - $x_1 = 1^\Sigma$ , das spezielle Element kommt nirgends vor
  - $y_1 = 1$  und  $\forall s \in S' : y_s = 0$ , wir definieren das label das spezielle Element 1, für alle anderen 0

- z.z. Lemma:  $\bigcup_{\sigma \in \Sigma'} = S' \Leftrightarrow \forall s \in S' : \prod_{\sigma \in \Sigma'} x_s(\sigma) = 0$   
 set-cover kann umgeschrieben werden in ein Produkt mittel der Funktion  $x_s$   
 (das Produkt verhält sich wie ein logisches UND)
  - $\bigcup_{\sigma \in \Sigma'} = S'$
  - $\Leftrightarrow \forall s \in S' \exists \sigma \in \Sigma' : s \in \sigma$ , für jedes Sample ex. eine TM mit diesem Sample
  - $\Leftrightarrow$  für dieses Sample gilt somit  $x_s(\sigma) = 0$ , d.h. es ex. ein Sample für die die Funktion 0 ist
  - $\Leftrightarrow$  Existenz kann mittel des logischen UND's repräsentiert werden  
 $\forall s \in S' : \prod_{\sigma \in \Sigma'} x_s(\sigma) = 0$
- **Beweis NP-hardness:**  
 z.z.:  $\exists \Sigma' \subseteq \Sigma$  von  $S'$  mit  $|\Sigma'| \leq m \Leftrightarrow \exists \theta \in \Theta : R(\theta) \leq m$  und  
 $\forall s \in S : f_\theta(x_s) = y_s$   
 d.h., es ex. ein Lösung von set-cover mit bound m gdw. es Parameter  $\theta$  mit Komplexität  $\leq m$  gibt und alle Samples korrekt inferred werden
- ( $\Rightarrow$ )
  - Sei  $\Sigma' \subseteq \Sigma$  ein Cover von S mit  $|\Sigma'| \leq m$
  - Sei  $V_0 = \emptyset$ ,  $V_1 = \Sigma'$ , d.h wir definieren das Cover als Menge der nicht-negierten Variablen einer DNF
  - $\forall x' \in X : f_\theta(x') = \prod_{\sigma \in \Sigma'} x'(\sigma)$ , (DNF mit nur positiven Variablen)
  - siehe Lemma muss dieses Produkt gleich 0 sein  $\forall s \in S' : f(x_s) = 0$
  - Laut Definition gilt zudem  $f(1^\Sigma) = 1$
  - daraus folgt, dass alle Daten richtig gelabelt wurden  
 $\forall s \in S' : f(x_s) = y_s$
  - Da wir  $V_1 = \Sigma'$  und  $V_0 = \emptyset$  gesetzt haben, ist der Regularizer auch gleich  $R(\theta) = |\Sigma'| \leq m$
- ( $\Leftarrow$ )
  - Sei  $\theta \in \Theta$  s.d. alle Daten richtig inferred werden und  $R(\theta) \leq m$
  - TODO: verstehe Beh. am Anfang
  - TODO: what is going on here ?

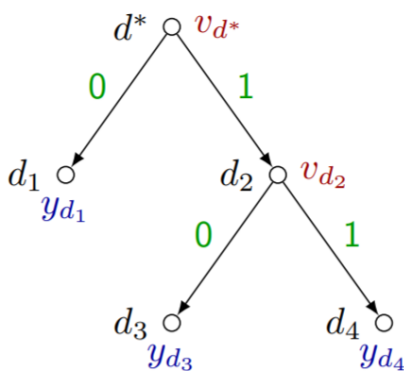
### 3 BTD's

#### 3.1 Formal

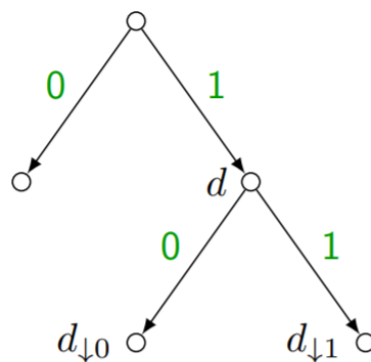
Ein V-variant BTD kann als Tupel  $\theta = (V, Y, D, D', d^*, E, \delta, v, y)$  wie folgt dargestellt werden

- eine Menge von Variablen:  $V \neq \emptyset$
- eine Menge von Werten:  $Y \neq \emptyset$
- einem (Sub)Tree  $(D \cup D', E)$ 
  - eine Menge von Inner-Nodes:  $D$
  - eine Menge von Leaves:  $D'$
  - ein Wurzelknoten:  $d^*$
  - Kanten:  $E$
- Kantenfunktion:  $\delta : E \rightarrow \{0, 1\}$ 
  - Jede Inner-Node ( $d \in D$ ) hat genau 2 ausgehende Kanten
  - $e = (d, d')$  mit  $\delta(e) = 0$
  - $e' = (d, d'')$  mit  $\delta(e') = 1$
- Variablenfunktion:  $v : D \rightarrow V$ , Weißt Inner-Nodes eine Variable zu
- Wertefunktion:  $y : D' \rightarrow Y$ , Weißt Blättern einen Wert zu

Des Weiteren definieren wir noch den **Nachfolgeknoten von d**, wenn wir den **Weg j** nehmen als  $d_{\downarrow j}$



(a) BTD



(b)  $d_{\downarrow}$

Für den Subtree von  $\theta$  mit der Wurzel  $d$  schreibt man  $\theta[d]$   
 Jeder Subtree von  $\theta$  mit Wurzel  $d$  ist selbst wieder ein V-variante Y-valued BTD  
 Für jeden BTD  $\theta$  lässt sich ebenfalls wieder eine Funktion  $f_\theta$  wie folgt definieren:

$$f_\theta : \{0, 1\}^V \rightarrow Y, \quad \forall x \in \{0, 1\}^V \quad f_\theta(x) = \begin{cases} y(d^*), & D = \emptyset \\ f_{\theta[d_{\downarrow 0}^*]}(x), & D \neq \emptyset \wedge x_v(d^*) = 0 \\ f_{\theta[d_{\downarrow 1}^*]}(x), & D \neq \emptyset \wedge x_v(d^*) = 1 \end{cases}$$

Diese Funktion löst den BTD nacheinander rekursiv auf und betrachtet dabei in jeder Iteration einen kleineren Sub-BTD, bis dieser nur noch aus einem einzelnen Knoten besteht

- ist der BTD leer, d.h. es gibt nur eine Node, d.h. die Wurzel ist zugleich ein Leave, dann nehme den Wert davon, Ende der Rekursion
- ist der Baum nicht leer, dann überprüfe die Variable an der Wurzel  $x_v(d^*)$  und dann:
  - nimm den linken Sub-BTD (0-Pfad) falls  $x_v = 0$
  - nimm den rechten Sub-BTD (1-Pfad) falls  $x_v = 1$
- Fahre mit dem Sub-BTD rekursiv weiter fort

Wie auch für DNF's kann für BTD's ein Regularizer angegeben werden, dieser gibt die **Tiefe** des BTD's an und ist ebenfalls rekursiv definiert:

$$R(\theta) = \begin{cases} 0, & D = \emptyset \\ 1 + \max\{R(\theta[d_{\downarrow 0}^*]), R(\theta[d_{\downarrow 1}^*])\}, & \text{else} \end{cases}$$

Quasi, **Wie lang ist der längste Pfad im Baum, beginnend von der Wurzel**

Ebenfalls kann für BTD's analog das supervised learning bzw. das bounded depth BTD problem definiert werden

### 3.2 NP-hard Beweis

Dazu reduzieren wir das NP-schwere **exact cover by 3-sets** Problem auf das **bounded depth BTD** Problem

Ein **exact cover** ist ein cover bei welchem alle Elemente paarweise disjunkt sind  
**exact cover by 3-sets problem:**

- Sei  $S$  eine Menge
- Sei  $\Sigma \subseteq 2^S \setminus \{\emptyset\}$



- Lässt sich ein  $\Sigma' \subseteq \Sigma$  finden, s.d. es nur Mengen der Größe 3 gibt, welche  $S$  exakt überdecken (dazu muss  $S$  natürlich ein vielfaches von 3 Elemente enthalten)

Definitionen:

- Sei  $(S', \Sigma)$  eine Instanz des exact cover by 3-sets problem
- Sei  $|S'| = 3n$  mit  $n \in \mathbb{N}$
- Wir konstruieren eine Instanz des m-bounded depth BTM Problems wie folgt:
  - Sei  $V = \Sigma$ , die Variablen des BTM's sind die möglichen Mengen welche zum Überdecken benutzt werden können
  - $S = S' \cup \{0\}$ , wir fügen ein distinktes Element  $0$  hinzu
  - Sei  $x : S \rightarrow \{0, 1\}^\Sigma$ , eine Funktion welche angibt ob ein Element in einer Menge vorkommt (analog wie bei DNF, nur invertiert)
  - Das spezielle Element  $0$  kommt dabei nirgends vor, d.h.  $x_0 = 0$
  - $y : S \rightarrow \{0, 1\}$ , weist dem speziellen Element  $0$  das Label 0 zu, allen anderen das Label 1, d.h.  $y_0 = 0$
  - $m = n$

Wir zeigen nun, dass es ein exact cover gibt gdw. das bounded BTM problem eine Lösung hat Beweis:

- $(\Rightarrow)$ 
  - Sei  $\Sigma' \subseteq \Sigma$  eine Lösung des exact cover Problems
  - Wir definieren uns eine beliebige Ordnung der TM's des Covers und ordnen sie demzufolge in einem BTM untereinander im 0-Pfad an  $\sigma' : [n] \rightarrow \Sigma'$
  - da wir  $m$  Variablen haben ist der Baum auch nur  $m$  tief, d.h.  $R(\theta) = m$
  - der BTM entscheidet alle Label korrekt
    - \*  $f_\theta(x_0) = 0 = y_s$  (Warum ?)
    - \* Da an jedem Knoten 3 Elemente auf 1 gemappt werden, sind am Ende  $3m$  Elemente gemappt, und das sind alle Elemente, ausgenommen  $0$
- $(\Leftarrow)$

- Sei  $\theta = (V, Y, D, D', d^*, E, \delta, \sigma, y')$  ein BTD, die Variablenfunktion wurde mit  $\sigma$  ausgetauscht
- Wir nehmen an, dass jeder 1-Pfad zu einem Blatt führt, mit dem Wert 1  $y'(d_{\downarrow 1}) = 1, \forall d \in D$
- Damit ist  $f_\theta(x) = 1$ , wenn es entlang des Weges im BTD, mindestens einmal das Element in einer Covermenge vorkommt (wird jeweils an den Knoten abgefragt, daher kann die Struktur wie ein großes UND aufgefasst werden)
- $\forall x \in X : f_\theta(x) = \begin{cases} 1, & \exists j \in [N] : x(\sigma_j) = 1 \\ 0, & \text{else} \end{cases}$
- durch Definition von  $x_s$  gilt,  $x(\sigma_j) = 1 \Leftrightarrow s \in \sigma_j$
- damit gibt es ein gültiges Set-Cover, d.h.  

$$\bigcup_{j=0}^{N-1} \sigma_j = S', \text{ s.d. alle Labels außer für } 0 \text{ gleich 1 sind}$$

$$(\forall s \in S' : y_s = 1)$$
- außerdem gilt  $N = m$ , da:
  - \*  $|S'| = 3m$  nach Definition
  - \*  $= \left| \bigcup_{j=0}^{N-1} \sigma_j \right|$
  - \*  $\leq \sum_{j=0}^{N-1} |\sigma_j|$
  - \*  $= \sum_{j=0}^{N-1} 3 = 3N \leq 3m$
- Somit gibt es keine Überschneidungen, d.h. das Cover ist exakt  

$$\forall \{j, l\} \in \binom{[N]}{2} : \sigma_j \cap \sigma_l = \emptyset$$
- damit ist  $\bigcup_{j=0}^{N-1} \sigma_j$  eine Lösung für das exact cover by 3-sets problem

## 4 lernen linearer Funktionen