Aluno: Ciro B Rosa

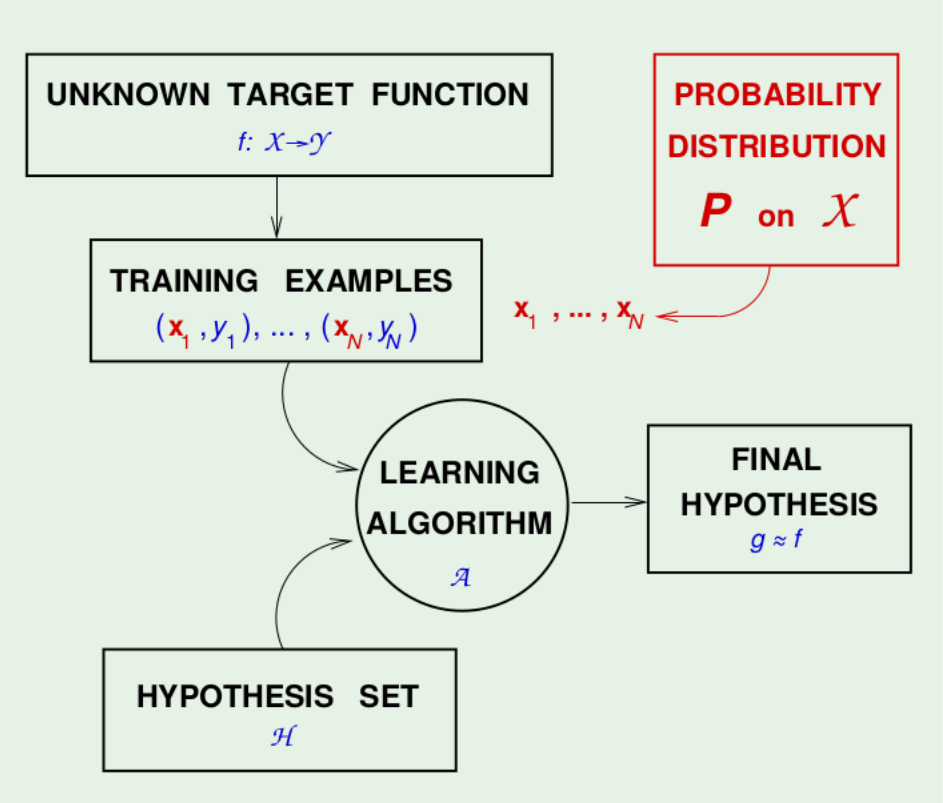
Número USP: 2320769

E-mail: ciro.rosa@alumni.usp.br

Disciplina: MAC0460/5832 - Introdução ao aprendizado de máquina

Lista 2 – Respostas

1. Comente sobre o diagrama abaixo. O que o diagrama como um todo ilustra e o que cada componente representa?



Considere um determinado processo ou sistema, cujas entradas (X) e saídas (y) são descritas exatamente pela função y = f(X). Considere também que a obtenção da função f exata apresenta dificuldades de ordem teórica e/ou prática. O diagrama apresentado resume um método genérico de obtenção de uma função g(X) que se aproxima da função f(X), a partir de:

- Um conjunto de hipóteses H, contendo uma família de funções $h_m(X)$ (n=1, ..., M).
- Um algoritmo de aprendizagem A, cujo propósito seria o de escolher uma das funções h_m (X) = g(X) (hipótese final) que melhor se aproxima de f(X).

Deste cenário, surge a questão: como avaliar o quanto uma dada função conhecida h_m (X) se aproxima de uma função desconhecida f(X)?

Para responder à pergunta, o diagrama propõe o uso de uma base de dados finita (training examples), contendo exemplos de entradas X e saídas y = f(X), como base para escolha da função aproximada g(X) dentre as diversas funções h_m (X) contidas no conjunto de hipóteses H.

De modo a garantir comportamento aleatório da base de dados, de forma similar à aleatoriedade observada na população que lhe deu origem, o bloco em vermelho indica a necessidade de aleatoriedade na escolha dos exemplos (X, y). Desta forma, utiliza-se a distribuição estatística da amostra como inferência aproximada da distribuição real de toda a população.

2. O que é Ein e Eout?

A letra E denota uma medida de erro entre as respostas reais y observadas e y_hat previstas em uma população, para um mesmo conjunto X de entradas. Eout refere-se ao erro "out-of-sample", ou seja, observações reais y e previsões y_hat para toda a população. Ein refere-se ao erro "in-sample" restrita a uma amostra retirada da população, entre as respostas reais y e as previstas y_hat.

3. Quando consideramos a formulação teórica de aprendizado de máquina, uma das possibilidades é investigar o valor |Ein – Eout|. O que esse valor expressa e por que nos interessa investigar ele?

O valor |Ein – Eout| é uma estimativa do erro que se comete ao estimar a distribuição de probabilidades out-of-sample pela distribuição in-sample. Na formulação teórica, Eout é desconhecido, essencialmente por dois fatores:

- Pelo fato de que a função exata f que relaciona y = f(X) ser desconhecida;
- Pelo fato de que talvez seja inviável na prática conhecer todas as respostas reais y em uma grande população.

Por estes motivos, busca-se estimar Eout através de sua aproximação Ein. Quanto melhor for a similaridade entre essas duas grandezas, mais precisa será a estimativa g(X) da função f(X).

4. A desigualdade de Hoeffding, no contexto de aprendizado de máquina, com respeito a uma certa hipótese h, é dada por:

$$\boldsymbol{P}(\,|\boldsymbol{Ein}(\boldsymbol{h}) - \boldsymbol{Eout}(\boldsymbol{h})| > \in) \leq \boldsymbol{2e^{-2\in^2 N}}$$

Explique o significado dessa desigualdade.

O significado e importância da desigualdade de Hoeffding está na estimativa por um limite superior de uma probabilidade essencialmente desconhecida (o lado esquerdo da desigualdade) por uma quantidade totalmente conhecida e ajustável pelo projeto (lado direito), já que ∈ (erro máximo permitido para a aproximação de f(X) por h(X)) e N (número de observações da amostra) são parâmetros de controle do projeto.

5. A desigualdade de Hoeffding, no contexto de aprendizado de máquina, quando selecionamos uma hipótese de um espaço com M hipóteses é dada por:

$$\boldsymbol{P}(\,|\boldsymbol{Ein}(\boldsymbol{g}) - \boldsymbol{Eout}(\boldsymbol{g})| > \in) \leq \boldsymbol{2Me^{-2\in^2 N}}$$

Comente sobre a diferença entre essa desigualdade e a do item anterior.

A questão anterior indica a desigualdade de Hoeffding para o caso de se avaliar o erro de uma única hipótese h, contida no espaço H de hipóteses.

Considerando que o espaço amostral H pode ser escolhido contendo M hipóteses diferentes, a inequação traduz o erro máximo que este conjunto de M hipóteses traz para a solução g(X). Caso as soluções possíveis sejam disjuntas entre si, temos a igualdade da inequação. Caso as soluções possuam algum tipo de sobreposição, temos o "menor que".

6. O bound $2Me^{-2\epsilon^2 N}$ no item anterior foi obtido aplicando-se o union-bound. O que é union-bound?

Como explicado, a desigualdade de Hoeffding na questão 4 é aplicada para uma única hipótese h, conhecida, escolhida dentro do espaço de hipóteses H. Caso a hipótese g (aproximação de f) fosse conhecida a priori, a desigualdade seria aplicável sem restrições.

O fato é que f(X) é desconhecida e g(X) só será escolhida a posteriori, dentre as opções h(X). O union-bound é a forma de se estimar o erro da função g(X) a priori, a partir da união entre todas as hipóteses h contidas em H.

7. O que são dicotomias? O que é growth-function? O que é break point? Qual a relação entre eles?

Seja X um vetor de dados de entrada e seja h uma hipótese que classifica de forma binária o vetor X através de y = h(X). Ou seja, X pode pertencer ao grupamento y = +1 ou y = -1. Nesta descrição, os grupamentos são formalmente conhecidos como dicotomias.

Seja um espaço de hipóteses H, possuindo um número M de hipóteses. De forma geral, M pode ser infinito. Ainda de forma geral, sejam duas hipóteses distintas h1 e h2 pertencentes a H, porém classificando exatamente da mesma forma um mesmo conjunto finito X de entrada. Nesse sentido, h1 e h2 são hipóteses que se equivalem, e podem ser representadas por uma única hipótese "equivalente". O número total de diferentes hipóteses "equivalentes" de um espaço H é dado pela growth-function mH(N), sendo que mH(N) < M.

Por definição, se nenhum dataset de tamanho k pode ser dividido/classificado pelo espaço de hipóteses H, então k é definido como um break point para H.

8. O que você entendeu sobre o processo envolvido na troca do M em $2Me^{-2\epsilon^2 N}$ pelo growth-function mH(N)? Qual o interesse em se fazer essa troca? Qual é o novo bound obtido após a troca?

Conforme mencionado na questão 7, o número de hipóteses M de um espaço H pode ser infinito, o que leva a um bound infinito para a desigualdade de Hoeffding. A growth function mH(N), por ser um número finito, retoma a desigualdade para um bound também finito.

Considerando-se a growth-function, o bound passa a ser o termo da raiz quadrada abaixo:

$$E_{out}(g) \leq E_{in}(g) + \sqrt{\frac{8}{N} ln \frac{4m_H(2N)}{\delta}}$$

9. Dissemos que a VC dimension relaciona-se com a expressividade do espaço de hipóteses. Comente sobre isso.

Não me recordo sobre comentário sobre expressividade do espaço de hipóteses, porém tomando como "d" o número de dimensões do vetor de entrada X, a VC-dimension (dVC) de um perceptron seria igual a "d+1". dVC seria, de certa forma, o tamanho equivalente (menor que d) capaz de dividir o espaço de pontos X.

10. Como o VC bound é expresso em termos da VC dimension?

Expressando Eout(g) como sendo:

$$E_{out}(g) \leq E_{in}(g) + \Omega(N, H, \delta)$$

Temos o bound para Eout definido como Ω em função de dVC:

$$\Omega(N, H, \delta) \leq \sqrt{\frac{8}{N} \ln \frac{4((2N)^{d_{VC}} + 1)}{\delta}}$$

11. Baseado no VC bound, explique como podemos calcular o número de amostras necessárias para se garantir uma certa precisão, com probabilidade 1 -δ, supondo que o espaço de hipóteses considerado tem dimensão VC igual a dVC?

A estimativa do tamanho de amostras N pode ser derivada de forma iterativa, a partir da inequação

$$N \geq \frac{8}{\epsilon^2} \ln \frac{4((2N)^{d_{VC}} + 1)}{\delta}$$

onde as quantidades dVC, ∈ (erro admitido para o modelo) e δ(assertividade do modelo) são conhecidos:

- Estima-se um valor inicial para N no lado direito da inequação;
- Calcula-se o lado direito da inequação;
- Se o valor inicial de N é maior que o valor calculado acima, toma-se este como o tamanho da amostra. Caso negativo, repete-se o ciclo com o valor calculado.

12. Por que apenas garantir $|\boldsymbol{Ein}(\boldsymbol{h}) - \boldsymbol{Eout}(\boldsymbol{h})|$ não é suficiente?

Creio que falta a pergunta especificar o "propósito da suficiência" à qual se faz referência. De forma genérica, é possível especular que a expressão acima refere-se à avaliação de uma única hipótese h, a qual não é necessariamente a melhor hipótese do espaço H, denotada por g.

13. Quais as similaridades e diferenças entre o VC analysis e o Bias-variance analysis?

14. Escreva a sua opinião sobre quão úteis são os conteúdos cobertos nas lectures mencionadas para o entendimento sobre Machine Learning.

Em meu caso específico, tive um treinamento profundo, porém focado apenas na prática, sobre codificação em R para obtenção de algoritmos de ML. As aulas, e em especial a leitura do livro após discussão em classe, trouxe o embasamento teórico que me faltava.