Calcul numeric

Metode nucleu (kernel)

Paul Irofti
Andrei Pătrașcu
Cristian Rusu

Departmentul de Informatică

Facultatea de Matematică și Informatică

Universitatea din București

Email: prenume.nume@fmi.unibuc.ro

Cuprins

- probleme de învățare automată
- modele liniare
- tipuri de modele nelineare
- metode kernel
- exemple
- aplicații

Probleme de învățare automată

- probleme supervizate

- primim un set de date cu N elemente, sub formă de perechi:

$$\mathcal{S} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \ldots, (\mathbf{x}_N, y_N)\} \quad (1)$$

unde proprietățile $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ și eticheta $y_i \in \mathbb{R}$ sau $y_i \in \{0, 1\}$

- tipuri de probleme supervizate
  - regresie, eticheta este $y \in \mathbb{R}$
  - clasificare, eticheta este $y \in \{0, 1\}$

- exemplu: $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ poate să fie o imagine (dacă imaginea este 1024×1024 pixeli atunci $d = 1024^2$) iar $y_i \in \{\text{cat}, \text{dog}\}$
- exemplu: $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ sunt proprietățile unei case de vânzare iar $y_i \in \mathbb{R}_+$ este prețul

Probleme de învățare automată

- probleme nesupervizate

- primim un set de date cu N elemente:

$$\mathcal{S} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\} \tag{2}$$

unde proprietățile $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$, dar de data aceasta fară eticheta y_i

- tipuri de probleme supervizate
  - reducere dimensională
  - detectrea anomaliilor

- exemplu: $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ poate să fie o imagine (dacă imaginea este 1024×1024 pixeli atunci $d = 1024^2$) problema poate să fie sa reducem dimensiunea datelor dacă 1024^2 este prea mare

Modele liniare

- probleme supervizate: regresie
- primim un set de date cu N elemente, sub formă de perechi:

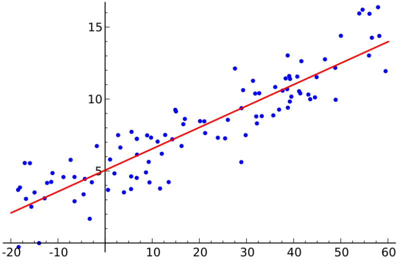
$$\mathcal{S} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_N, y_N)\}$$

unde $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ și eticheta $y_i \in \mathbb{R}$

- ce înțelegem bine, sunt **problemele și modele liniare**
  - adică avem o functie $f_w(\mathbf{x}_i) \approx y_i$ pentru toți $i = 1, \dots, N$
  - dacă f_w este liniară atunci $f_w(\mathbf{x}_i) = \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i$
  - adică avem o funcție care face o combinație liniară a proprietăților

Modele liniare

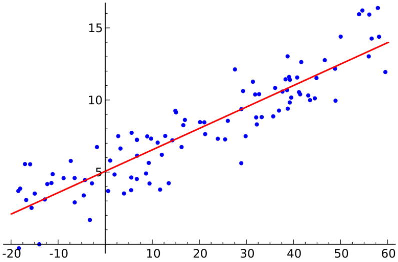
- ce înțelegem bine, sunt **problemele și modele liniare**
  - adică avem o functie $f_w(\mathbf{x}_i) \approx y_i$ pentru toți $i = 1, \ldots, N$
  - dacă f_w este liniară atunci $f_w(\mathbf{x}_i) = \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i$
  - adică avem o funcție care face o combinație liniară a proprietăților



  - aici $d = 1$ deci x_i sunt numere (nu vectori) – și sunt pe axa ox
  - y_i este valoare pe axa oy
  - exemplu: x_i poate să fie câți bani are în cont persoana i, y_i este câți bani ar mai putea împrumuta de la o bancă

Modele liniare

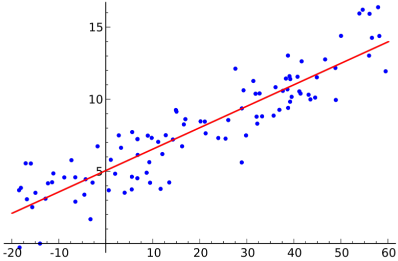
- ce înțelegem bine, sunt **problemele și modele liniare**
  - adică avem o functie $f_w(\mathbf{x}_i) \approx y_i$ pentru toti $i = 1, \ldots, N$
  - dacă f_w este liniară atunci $f_w(\mathbf{x}_i) = \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i$
  - adică avem o funcție care face o combinație liniară a proprietăților



  - atunci $f_w(x_i) = y_i$ și avem

$$\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i = \begin{bmatrix} w_0 & w_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x_i \end{bmatrix} = w_0 + w_1 x_i = y_i \tag{3}$$

Modele liniare



- atunci $f_w(x_i) = y_i$ și avem

$$\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i = \begin{bmatrix} w_0 & w_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ x_i \end{bmatrix} = w_0 + w_1 x_i = y_i \tag{4}$$

- trebuie să îi aflăm pe w_0 și w_1
- rezolvăm:

$$\underset{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^2}{\text{minimizează}} \sum_{i=1}^{N} \ell(f_w(\mathbf{x}_i), y_i) + \lambda\|\mathbf{w}\|_2^2 \tag{5}$$

Modele liniare

- rezolvăm:

$$\text{minimizează} \sum_{i=1}^{N} \ell(f_w(\mathbf{x}_i), y_i) + \lambda \|\mathbf{w}\|_2^2 \tag{6}$$

- pierderea (*loss function*) se definește
$\ell(f_w(\mathbf{x}_i), y_i) = (f_w(\mathbf{x}_i) - y_i)^2 = (\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i - y_i)^2 = (w_0 + w_1 x_i - y_i)^2$

- problema devine:

$$\underset{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^2}{\text{minimizează}} \sum_{i=1}^{N} (\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i - y_i)^2 + \lambda \|\mathbf{w}\|_2^2 \tag{7}$$

- de minim câte puncte N avem nevoie?

Modele liniare

- rezolvăm:

$$\text{minimizează} \sum_{i=1}^{N} \ell(f_w(\mathbf{x}_i), y_i) + \lambda \|\mathbf{w}\|_2^2 \tag{6}$$

- pierderea (*loss function*) se definește
$\ell(f_w(\mathbf{x}_i), y_i) = (f_w(\mathbf{x}_i) - y_i)^2 = (\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i - y_i)^2 = (w_0 + w_1 x_i - y_i)^2$

- problema devine:

$$\underset{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^2}{\text{minimizează}} \sum_{i=1}^{N} (\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i - y_i)^2 + \lambda \|\mathbf{w}\|_2^2 \tag{7}$$

- de minim câte puncte N avem nevoie? $N = 2$ pentru că avem doi parametrii de aflat, avem nevoie de două constrângeri

Modele liniare

- problema devine:

$$\underset{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^2}{\text{minimizează}} \sum_{i=1}^{N}(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i - y_i)^2 + \lambda\|\mathbf{w}\|_2^2 \tag{8}$$

- de minim câte puncte N avem nevoie? $N = 2$ pentru că avem doi parametrii de aflat, avem nevoie de două constrângeri
- de ce avem nevoie de mai multe puncte? pentru că în general $f_w(\mathbf{x}_i) = y_i + \epsilon_i$ (se adaugă zgomot, deci măsurătorile nu sunt perfecte - cu mai multe măsurători mitigăm efectul zgomotului)
- fie $\mathbf{X} = \begin{bmatrix}\mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \dots & \mathbf{x}_N\end{bmatrix}$ și $\mathbf{y} = \begin{bmatrix}y_1 & y_2 & \dots & y_N\end{bmatrix}^T$
- dacă $N = 2$ cum aflăm $\mathbf{w}$?
- dacă $N > 2$ cum aflăm $\mathbf{w}$?

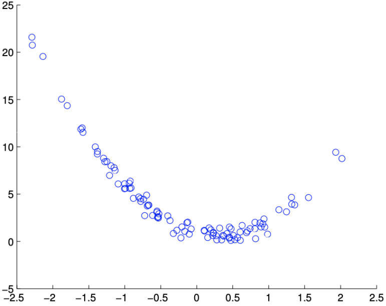
Modele liniare

- problema devine:

$$\underset{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^2}{\text{minimizează}} \sum_{i=1}^{N}(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i - y_i)^2 + \lambda\|\mathbf{w}\|_2^2 \tag{9}$$

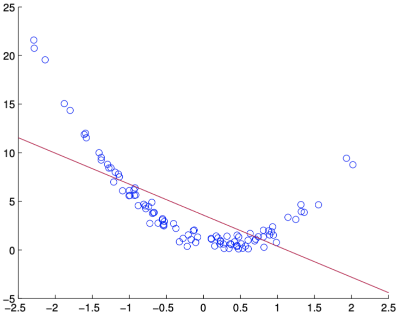
- de minim câte puncte N avem nevoie? $N = 2$ pentru că avem doi parametrii de aflat, avem nevoie de două constrângeri
- de ce avem nevoie de mai multe puncte? pentru că în general $f_w(\mathbf{x}_i) = y_i + \epsilon_i$ (se adaugă zgomot, deci măsurătorile nu sunt perfecte - cu mai multe măsurători mitigăm efectul zgomotului)
- fie $\mathbf{X} = \begin{bmatrix}\mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \dots & \mathbf{x}_N\end{bmatrix}$ și $\mathbf{y} = \begin{bmatrix}y_1 & y_2 & \dots & y_N\end{bmatrix}^T$
- dacă $N = 2$ cum aflăm $\mathbf{w}$? rezolvăm un sistem $\mathbf{X}\mathbf{w} = \mathbf{y}$ și atunci $\mathbf{w} = \mathbf{X}^{-1}\mathbf{y}$
- dacă $N > 2$ cum aflăm $\mathbf{w}$? cele mai mici pătrate $(\mathbf{X}\mathbf{X}^T + \lambda\mathbf{I}_2)\mathbf{w} = \mathbf{X}\mathbf{y}$ și atunci $\mathbf{w} = (\mathbf{X}\mathbf{X}^T + \lambda\mathbf{I}_2)^{-1}\mathbf{X}\mathbf{y}$

Modele liniare



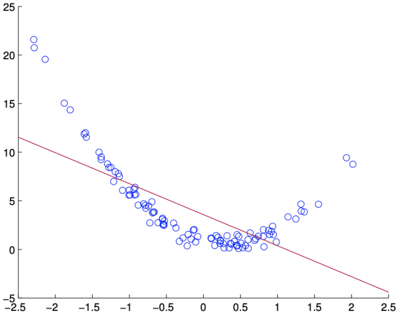
- ce facem acum? cum arată soluția liniară acum?

Tipuri de modele nelineare



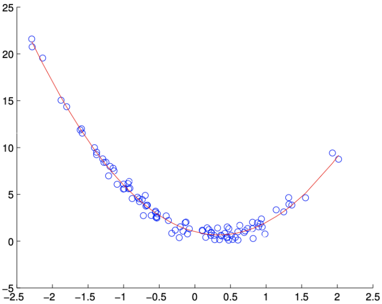
- soluția liniară nu corespunde realității
- cum adăugăm nelineritate în problema/soluția noastră?
  - **metode nucleu (kernel)**
  - rețele neuronale

Tipuri de modele nelineare



- soluția liniară nu corespunde realității
- cum adăugăm nelineritate în problema/soluția noastră?
  - **metode nucleu (kernel)**
- avem x_i și putem genera noi: $x_i^2, x_i^3, \ldots, \cos(x_i), \sin(x_i), \ldots, e^{x_i}, \ldots$ pe care le putem considera proprietăți *noi*

Tipuri de modele nelineare



- acum $f_w(x_i) = w_0 + w_1 x_i + w_2 x_i^2 = \begin{bmatrix} w_0 & w_1 & w_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 \\ x_i \\ x_i^2 \end{bmatrix}$
- obsersați că în necunoscutele $\mathbf{w}$ problema este tot liniară
- nelinearitatea este în felul în care am ales indicatori noi (am ridicat la pătrat x_i)

Un exemplu

- ni se dă un set de date
  $\mathcal{S} = \{(-1.1, 2), (-0.4, 1), (0.1, 1.4), (0.8, -5)\}$
- presupunem că modelul corect este un polinom de grad 3
  $f_w(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + w_3 x^3$
- atunci noi avem $f_w(-1.1) = 2$, $f_w(-0.4) = 1$ ș.a.m.d
- toate aceste relații se pot scrie astfel

$$\begin{bmatrix} 1 & -1.1 & (-1.1)^2 & (-1.1)^3 \\ 1 & -0.4 & (-0.4)^2 & (-0.4)^3 \\ 1 & 0.1 & 0.1^2 & 0.1^3 \\ 1 & 0.8 & 0.8^2 & 0.8^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 1.4 \\ -5 \end{bmatrix} \tag{10}$$

Un exemplu

- toate aceste relații se pot scrie astfel

$$\begin{bmatrix} 1 & -1.1 & (-1.1)^2 & (-1.1)^3 \\ 1 & -0.4 & (-0.4)^2 & (-0.4)^3 \\ 1 & 0.1 & 0.1^2 & 0.1^3 \\ 1 & 0.8 & 0.8^2 & 0.8^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 1.4 \\ -5 \end{bmatrix} \tag{11}$$

- dacă $x_i < 1$ atunci puterile tot mai mari fac ca x_i^k să fie tot mai mic, invers dacă $x_i > 1$ atunci x_i^k va fi tot mai mare
- deși matricea va fi inversabilă (dacă $\mathcal{S}$ nu are dubluri pe punctele $\mathbf{x}_i$) va avea numărul de condiționare $\kappa(\mathbf{X})$ foarte mare (prost)
- când $\kappa(\mathbf{X})$ este mare atunci pățim în $\mathbf{w}$ să avem elemente de genul 10^{10} și -10^{11} (numere mari care aproape se anulează, soluția nu este stabilă)

Un exemplu

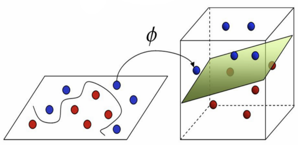
- toate aceste relații se pot scrie astfel

$$\begin{bmatrix} 1 & -1.1 & (-1.1)^2 & (-1.1)^3 \\ 1 & -0.4 & (-0.4)^2 & (-0.4)^3 \\ 1 & 0.1 & 0.1^2 & 0.1^3 \\ 1 & 0.8 & 0.8^2 & 0.8^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 1.4 \\ -5 \end{bmatrix} \tag{12}$$

- când $\kappa(\mathbf{X})$ este mare atunci pățim în **w** să avem elemente de genul 10^{10} și -10^{11} (numere mari care aproape se anulează, soluția nu este stabilă)
- soluția: acel $+\lambda\|\mathbf{w}\|_2^2$ pentru că din cauza lui în loc să inversăm $\mathbf{X}$, inversăm $\mathbf{X} + \lambda\mathbf{I}$ care are κ mult mai bun (mult mai mic) și în **w** nu mai apar numere mari cu semne opuse
- $+\lambda\|\mathbf{w}\|_2^2$ se numește **regularizare**

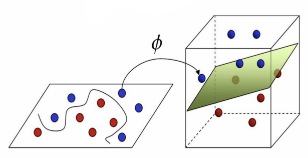
Metode nucleu (kernel)

- pornim de la un $\mathbf{x}_i$ care este in dimensiune $\mathbb{R}^d$ și ajungem într-o altă dimensiune $\mathbb{R}^D$ cu $D \gg d$ (calculăm tot felul de funcții cu $\mathbf{x}_i$)
- **ideea de bază**: $\mathbf{x}_i \xrightarrow{\phi} \begin{bmatrix} 1 \\ \mathbf{x}_i^2 \\ \mathbf{x}_i^{(1)} \times \mathbf{x}_i^{(2)} - \mathbf{x}_i^{(3)} \\ \cos(\mathbf{x}_i) \\ \vdots \\ e^{\mathbf{x}_i} \end{bmatrix}$



Metode nucleu (kernel)

- **ideea de bază**: $\mathbf{x}_i \xrightarrow{\phi} \begin{bmatrix} 1 \\ \mathbf{x}_i^2 \\ \mathbf{x}_i^{(1)} \times \mathbf{x}_i^{(2)} - \mathbf{x}_i^{(3)} \\ \cos(\mathbf{x}_i) \\ \vdots \\ e^{\mathbf{x}_i} \end{bmatrix}$



- **inițial problema nu se putea rezolva liniar, dar când am adăugat proprietăți mai multe atunci da**

Metode nucleu (kernel)

- **ideea de bază**: $\mathbf{x}_i \xrightarrow{\phi} \begin{bmatrix} 1 \\ \mathbf{x}_i^2 \\ \mathbf{x}_i^{(1)} \times \mathbf{x}_i^{(2)} - \mathbf{x}_i^{(3)} \\ \cos(\mathbf{x}_i) \\ \vdots \\ e^{\mathbf{x}_i} \end{bmatrix}$
- dar cum alegem acest ϕ? fiecare element din ϕ e o funcție de elemente, de unde scoatem aceste elemente (pot fi funcții polinomiale, trigonometrice sau orice altceva)? și câte sunt? adică cum alegem D?
- am vrea cât mai multe, intuiția: cu cât sunt mai multe și mai diferite cu atât e mai mare probabilitatea să găsim o formă apropiată de conținutul datelor

Metode nucleu (kernel)

- ni se dă $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$
- transformăm $\mathbf{x}$ în $\phi(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \phi_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \phi_D(\mathbf{x}) \end{bmatrix}$ care este un vector în $\mathbb{R}^D$
- atunci $\phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^D$ se numește *feature map* (maparea proprietăților)
- y nu pățește nimic
- funcția noastră liniară este $f_w(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{D} w_j \phi_j(\mathbf{x})$ iar $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^D$ trebuie calculat

Metode nucleu (kernel)

- înainte aveam matricea cu date $\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \dots & \mathbf{x}_N \end{bmatrix}$ de dimensiune $d \times N$
- acum avem datele transformate $\mathbf{\Phi} = \begin{bmatrix} \phi(\mathbf{x}_1) & \phi(\mathbf{x}_2) & \dots & \phi(\mathbf{x}_N) \end{bmatrix}$ de dimensiune $D \times N$
- înainte am rezolvat $\mathbf{w} = (\mathbf{X}\mathbf{X}^T + \lambda \mathbf{I}_d)^{-1}\mathbf{X}\mathbf{y}$
- acum rezolvăm $\mathbf{w} = (\mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^T + \lambda \mathbf{I}_D)^{-1}\mathbf{\Phi}\mathbf{y}$
- problema acum este de dimensiune $D \times D$ este extrem de mare (vedem imediat ca vrem D să fie enorm)
- Teorema de reprezentare: $\mathbf{w}$ soluția sistemului cu $\mathbf{\Phi}$ se scrie

$$\mathbf{w} = \mathbf{\Phi}\mathbf{c} = \sum_{i=1}^{N} \phi(\mathbf{x}_i) c_i. \tag{13}$$

Adică soluția noastră este o combinație liniară a coloanelor din matricea de date transformate $\mathbf{\Phi}$ (metodă neparametrică). Iar $\mathbf{c} = (\mathbf{\Phi}^T\mathbf{\Phi} + \lambda \mathbf{I}_N)^{-1}\mathbf{y}$

Metode nucleu (kernel)

- Teorema de reprezentare: $\mathbf{w}$ soluția sistemului cu $\boldsymbol{\Phi}$ se scrie

$$\mathbf{w} = \boldsymbol{\Phi}\mathbf{c} = \sum_{i=1}^{N} \phi(\mathbf{x}_i)c_i, \text{ iar } \mathbf{c} = (\boldsymbol{\Phi}^T\boldsymbol{\Phi} + \lambda\mathbf{I}_N)^{-1}\mathbf{y}. \tag{14}$$

- Dem. (folosim $\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T$, $\boldsymbol{I}_d = \boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^T$ și $\boldsymbol{I}_D = \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T$):

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{w} =& (\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^T + \lambda\boldsymbol{I}_D)^{-1}\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{y} \quad (\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T)\\
=& (\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{U}^T + \lambda\boldsymbol{I}_D)^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{y} \quad (\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{V} = \boldsymbol{I}_N)\\
=& (\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}^2\boldsymbol{U}^T + \lambda\boldsymbol{I}_D)^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{y} \quad (\boldsymbol{I}_D = \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{U})\\
=& (\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}^2\boldsymbol{U}^T + \lambda\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T)^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{y} \quad (\boldsymbol{U} \text{ factor și } \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}_D)\\
=& \boldsymbol{U}(\boldsymbol{\Sigma}^2 + \lambda\boldsymbol{I}_N)^{-1}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{y} \quad \text{două matrice diagonale comută}\\
=& \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{\Sigma}^2 + \lambda\boldsymbol{I}_N)^{-1}\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{y} \quad \ldots\\
=& \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{V}(\boldsymbol{\Sigma}^2 + \lambda\boldsymbol{I}_N)^{-1}\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{y}\\
=& \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^2\boldsymbol{V}^T + \lambda\boldsymbol{V}\boldsymbol{I}_N\boldsymbol{V}^T)^{-1}\boldsymbol{y}\\
=& \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^2\boldsymbol{V}^T + \lambda\boldsymbol{I}_N)^{-1}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{\Phi}^T\boldsymbol{\Phi} + \lambda\boldsymbol{I}_N)^{-1}\boldsymbol{y}
\end{aligned}$$

Metode nucleu (kernel)

ce am făcut?

- am ajuns de la

$$\mathbf{w} = (\mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^T + \lambda \mathbf{I}_D)^{-1}\mathbf{\Phi}\mathbf{y} \tag{15}$$

  o problemă $D \times D$

- până la

$$\mathbf{w} = \mathbf{\Phi}(\mathbf{\Phi}^T\mathbf{\Phi} + \lambda \mathbf{I}_N)^{-1}\mathbf{y} \tag{16}$$

  o problemă $N \times N$

- de ce ne-am chinuit atât de mult? pentru că D va fi enorm, mult mai mare și decât N (și d). **defapt D va fi infinit**. deci nici nu am putea să rezolvăm în forma inițială problema

Metode nucleu (kernel)

- pentru oricare $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ funcția noastră va fi

$$\begin{aligned} f_w(\mathbf{x}) =& \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x})^T \\ =& \phi(\mathbf{x})^T \mathbf{w} \\ =& \phi(\mathbf{x})^T \mathbf{\Phi c} \\ =& \phi(\mathbf{x})^T \mathbf{\Phi}(\mathbf{\Phi}^T \mathbf{\Phi} + \lambda \mathbf{I}_N)^{-1} \mathbf{y} \\ =& \mathbf{K}_\mathbf{x}^T (\mathbf{K} + \lambda \mathbf{I}_N)^{-1} \mathbf{y} \\ =& \mathbf{K}_\mathbf{x}^T \mathbf{c} \end{aligned} \tag{17}$$

- $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ se numește matricea de kernel, elementul de pe pozitia (i, j) este $\phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j)$
- $\mathbf{K}_\mathbf{x}$ este un vector care conține de poziția j elementul $\phi(\mathbf{x})^T \phi(\mathbf{x}_j)$
- **idee importantă**: nu avem nevoie să știm $\phi(\mathbf{x})$ avem nevoie doar să știm elemente de tipul $\phi(\mathbf{x})^T \phi(\mathbf{z})$
- **aceste se numește trucul kernel (the kernel trick)**, nu avem nevoie de niciun ϕ doar de produse scalare între ϕ-uri

Metode nucleu (kernel)

- deci nu ne trebuie ϕ, ne trebuie doar să știm cum să calculăm

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j) \tag{18}$$

  unde $\mathbf{x}_i$ și $\mathbf{x}_j$ sunt oricare două puncte din setul de date care ne este dat

- ce proprietăți trebuie să aibă acest nucleu (kernel)?
  - să fie simetric $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i)$
  - toată matricea $\mathbf{K}$ să fie simetrică și pozitiv definită (toate valorile proprii să fie pozitive)

Exemple (câteva)

- kernel liniar

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j \tag{19}$$

- kernel polinomial

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j + 1)^p \tag{20}$$

- kernel Gaussian

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2^2}{2\sigma^2}\right) \tag{21}$$

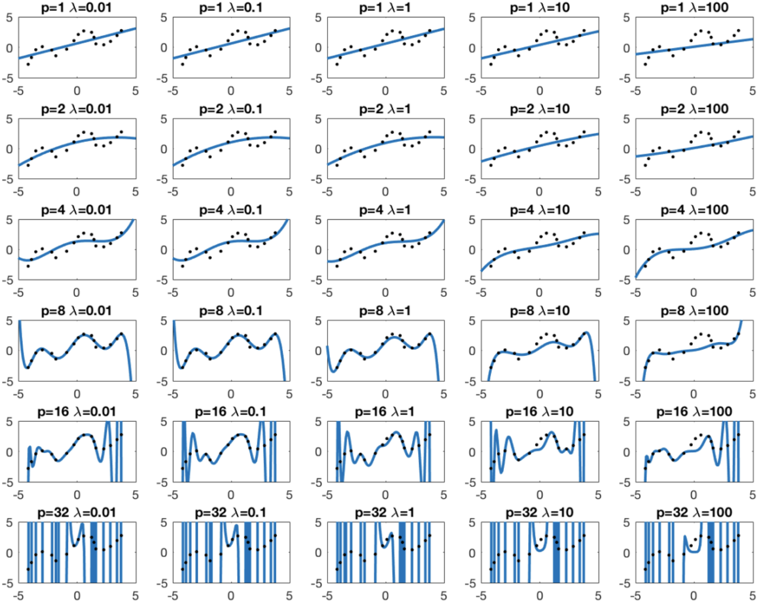
- kernel Gaussian RBF

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left(-\gamma\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2^2\right) \tag{22}$$

- kernel sigmoid

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \tanh(\alpha \mathbf{x}_i \mathbf{x}_j + \gamma) \tag{23}$$

Exemplu (kernel polinomial)



Cum folosim metode nucleu?

Antrenare:

- Avem un set de date $\mathcal{S} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_N, y_N)\}$ și alegem un kernel $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$.
- calculăm matricea kernel $\mathbf{K}$ de dimensiune $N \times N$.
- rezolvăm sistemul $\mathbf{c} = (\mathbf{K} + \lambda \mathbf{I}_N)^{-1}\mathbf{y}$, iar $\lambda \in \mathbf{R}_+$ îl alegem noi.

Testare:

- avem un nou punct $\mathbf{x}_{N+1}$.
- calculăm $k(\mathbf{x}_{N+1}, \mathbf{x}_i)$ pentru $i = 1, \dots, N$ (acesta este vectorul notat cu $\mathbf{K}_\mathbf{x}$ în curs).
- rezultatul este $f(\mathbf{x}_{N+1}) = \mathbf{K}_\mathbf{x}^T \mathbf{c}$.

Final

- aplicații ale metodelor de kernel vom vedea la seminar
- când folosiți multe biblioteci de python veți observa că vă lasă să folosiți un kernel (implicit sau standard este kernel-ul liniar)
- pe lângă rețele neuronale, sunt principala metodă de a adăuga nelinearități în problemele noastre
- ce să țineți minte: problema inițială este *ridicată* într-un spațiu dimensional mai mare unde clasificarea liniară este (câteodată, nu mereu) capabilă să rezolve problema
- tot ce am discutat se află pe un fundament teoretic solid bazat pe spații Hilbert (vectori și matrice infinit dimensionale)