מבוא למערכות לומדות
תרגיל 4

2 ביוני 2017

1 שקילות של הגדרות Soft-SVM

נראה את שקילות ההגדרות:

$$(1)\min_{\mathbf{w}}\frac{\lambda}{2}\left\|\mathbf{w}\right\|^{2}+\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\ell^{hinge}\left(y_{i}\left\langle \mathbf{w},\mathbf{x}_{i}\right\rangle \right)$$

$$(2)\min_{\mathbf{w},\{\xi_i\}}\frac{\lambda}{2}\left\|\mathbf{w}\right\|^{2}+\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\xi_{i}\text{ such that }\forall i,y_{i}\left\langle \mathbf{w},\mathbf{x}_{i}\right\rangle \geq1-\xi_{i}\text{ and }\xi_{i}\geq0$$

נניח ש־$\mathbf{w}$ הוא פתרון ל־(1). נזכור כי $\ell^{hinge}\left(y_{i}\left\langle \mathbf{w},\mathbf{x}_{i}\right\rangle \right)=\max\left\{ 0,1-y_{i}\left\langle \mathbf{w},\mathbf{x}_{i}\right\rangle \right\}$. יהיו $\{\xi_i\}$ כך שלכל i מתקיים $y_{i}\left\langle \mathbf{w},\mathbf{x}_{i}\right\rangle \geq1-\xi_{i}$ וגם $\xi_i\geq0$, כלומר $\mathbf{w},\{\xi_i\}$ הוא פתרון כלשהו ל־(2). אם כך:

$$\begin{aligned}
 & y_{i}\left\langle \mathbf{w},\mathbf{x}_{i}\right\rangle \geq1-\xi_{i}\\
\iff & \xi_{i}\geq1-y_{i}\left\langle \mathbf{w},\mathbf{x}_{i}\right\rangle
\end{aligned}$$

כמוכן, $\xi_i\geq0$ לכן: $\xi_{i}\geq\max\left\{ 0,1-y_{i}\left\langle \mathbf{w},\mathbf{x}_{i}\right\rangle \right\} =\ell^{hinge}\left(y_{i}\left\langle \mathbf{w},\mathbf{x}_{i}\right\rangle \right)$. זה נכון לכל i וכל הביטויים הנדונים הם אי־שליליים. לכן:

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\xi_{i}\geq\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\ell^{hinge}\left(y_{i}\left\langle \mathbf{w},\mathbf{x}_{i}\right\rangle \right)$$

אם כך, $\{\xi_i\}$ הטובים ביותר שאפשר לבחור (ולפיכך מהווים פתרון אופטימלי ל־(2)) הם $\xi_{i}'=\ell^{hinge}\left(y_{i}\left\langle \mathbf{w},\mathbf{x}_{i}\right\rangle \right)$, כלומר (1) ו־(2) נותנים את אותו פתרון.

2 גרעין חוקי (Valid Kernel)

נגדיר מיפוי $\psi:\left\{ M,\ldots,N\right\} \to\left\{ 0,1\right\} ^{N}$ באופן הבא:

$$x\mapsto(\overbrace{11\cdots1}^{x}\overbrace{0\cdots0}^{N-x})$$

לכל $x\in\left\{ M,\ldots,N\right\}$. נראה שלכל $x,x'\in\left\{ M,\ldots,N\right\}$ מתקיים $K\left(x,x'\right)=\left\langle \psi\left(x\right),\psi\left(x'\right)\right\rangle$. יהיו x,x' כנ"ל. נניח בה"כ ש־$x\leq x'$. לכן $M\leq\min\left\{ x,x'\right\} =x\leq x'\leq N$. מתקיים:

$$\begin{aligned}
 & \psi\left(x\right)=(\overbrace{11\cdots1}^{x}\overbrace{0\cdots0}^{N-x})\\
\implies & \forall i\in\left[N\right]\ \left(\psi\left(x\right)\right)_{i}\overset{*}{=}\begin{cases}
1, & i\leq x\left(\leq x'\right)\\
0, & \text{otherwise}
\end{cases}
\end{aligned}$$

ובאופן דומה:

$$
\begin{aligned}
(\psi(x'))_i &\overset{**}{=} \begin{cases} 1, & i \le x' \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \\
\implies \langle \psi(x), \psi(x') \rangle &\overset{1}{=} \sum_{i=1}^{N} (\psi(x))_i \cdot (\psi(x'))_i \\
&\overset{2}{=} \sum_{i=1}^{x} \overbrace{1 \cdot 1}^{i \le x \le x'} + \sum_{i=x+1}^{x'} \overbrace{1 \cdot 0}^{x < i \le x'} + \sum_{i=x'+1}^{N} \overbrace{0 \cdot 0}^{i > x'} \\
&= x \cdot 1 + (x' - x) \cdot 0 + (N - x') \cdot 0 = x \\
&= \min\{x, x'\} = K(x, x')
\end{aligned}
$$

כאשר:

1. לפי הגדרת המכפלה הפנימית
2. נובע מ־$(*)$ ו־$(**)$. נשים לב שהסכום האמצעי יכול להיות ריק (אם $x = x'$)

לכן ψ מקיימת: $K(x, x') = \langle \psi(x), \psi(x') \rangle$ לכל $x, x' \in \{M, \ldots, N\}$; כלומר K היא פונקציית kernel חוקית.

3 בחירת מודל

3.1

לכל היפותזה $h \in \mathcal{H}_k$ מתקיים:

$$L_{\mathcal{D}}(h) = \mathop{\mathbb{E}}_{S_{all} \sim \mathcal{D}^m} \left[L_{S_{all}}(h) \right]$$

לכן מאי־שוויון הופדינג מתקיים שלכל $\delta' \in (0,1)$:

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{P}\left[|L_{S_{all}}(h) - L_{\mathcal{D}}(h)| \le \sqrt{\frac{\ln(2/\delta')}{2m}} \right] \ge 1 - \delta' \\
\implies &\mathbb{P}\left[|L_{S_{all}}(h) - L_{\mathcal{D}}(h)| \ge \sqrt{\frac{\ln(2/\delta')}{2m}} \right] \le \delta' \\
\overset{\delta' = \frac{\delta}{|\mathcal{H}_k|}}{\implies} &\mathbb{P}\left[|L_{S_{all}}(h) - L_{\mathcal{D}}(h)| \ge \sqrt{\frac{\ln(2 \cdot |\mathcal{H}_k|/\delta)}{2m}} \right] \le \frac{\delta}{|\mathcal{H}_k|}
\end{aligned}
$$

אם כך, מחסם האיחוד מתקיים:

$$\mathbb{P}\left[\exists h \in \mathcal{H}_k : |L_{S_{all}}(h) - L_{\mathcal{D}}(h)| \ge \sqrt{\frac{\ln(2|\mathcal{H}_k|/\delta)}{2m}} \right] \le |\mathcal{H}_k| \frac{\delta}{|\mathcal{H}_k|} = \delta$$

נקבל שאם $h^* \in \mathrm{ERM}_{\mathcal{H}_k}(S_{all})$, בסיכוי לפחות $1 - \delta$ מתקיים שלכל $h \in \mathcal{H}_k$:

$$
\begin{aligned}
L_{\mathcal{D}}(h^*) &\le L_{S_{all}}(h^*) + \sqrt{\frac{\ln(2|\mathcal{H}_k|/\delta)}{2m}} \le L_{S_{all}}(h) + \sqrt{\frac{\ln(2|\mathcal{H}_k|/\delta)}{2m}} \\
&\le L_{\mathcal{D}}(h) + \sqrt{\frac{\ln(2|\mathcal{H}_k|/\delta)}{2m}} + \sqrt{\frac{\ln(2|\mathcal{H}_k|/\delta)}{2m}} = L_{\mathcal{D}}(h) + 2\sqrt{\frac{\ln(2|\mathcal{H}_k|/\delta)}{2m}} \\
&= L_{\mathcal{D}}(h) + \sqrt{\frac{2\ln(2|\mathcal{H}_k|/\delta)}{m}}
\end{aligned}
$$

ובפרט, הנ"ל מתקיים גם עבור $h \in \arg\min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}(h)$. לכן:

$$L_{\mathcal{D}}(h^*) \le \min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}(h) + \sqrt{\frac{2\ln\left(2|\mathcal{H}_k|/\delta\right)}{m}}$$

3.2

נניח ש־$\mathcal{H}_j \ni \arg\min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}(h) \notin \mathcal{H}_{j-1}$ (כלומר, ההיפותזה הממזערת את שגיאת ההכללה "מגיעה" מהמחלקה $\mathcal{H}_j$). נשים לב ש־$|S| = (1-\alpha)m, |V| = \alpha m, |\mathcal{H}| = k$. מהסעיף הקודם, עבור $h^* \in \mathrm{ERM}_{\mathcal{H}}(V)$ מתקיים בסיכוי לפחות $1-\frac{\delta}{2}$:

$$(1):L_{\mathcal{D}}(h^*) \le \min_{h\in\mathcal{H}} L_{\mathcal{D}}(h) + \sqrt{\frac{2}{\alpha m}\ln\left(\frac{4k}{\delta}\right)}$$

ומכיוון ש־$h_i \in \mathrm{ERM}_{\mathcal{H}_i}(S)$, בסיכוי לפחות $1-\frac{\delta}{2}$ מתקיים גם:

$$(2):L_{\mathcal{D}}(h_i) \le \min_{h\in\mathcal{H}_i} L_{\mathcal{D}}(h) + \sqrt{\frac{2}{(1-\alpha)m}\ln\left(\frac{4|\mathcal{H}_i|}{\delta}\right)}$$

לכל $i\in[k]$. לכן, בסיכוי לפחות $1-\delta$ מתקיים:

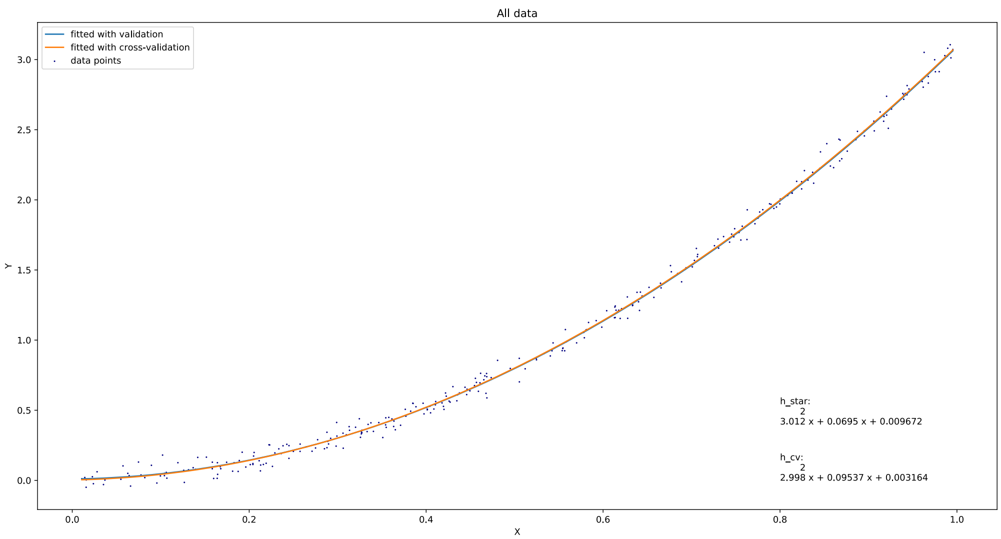
$$\begin{aligned}
L_{\mathcal{D}}(h^*) &\overset{(1)}{\le} \min_{h\in\mathcal{H}} L_{\mathcal{D}}(h) + \sqrt{\frac{2}{\alpha m}\ln\left(\frac{4k}{\delta}\right)} \le L_{\mathcal{D}}(h_j) + \sqrt{\frac{2}{\alpha m}\ln\left(\frac{4k}{\delta}\right)} \\
&\overset{(2)}{\le} \min_{h\in\mathcal{H}_j} L_{\mathcal{D}}(h) + \sqrt{\frac{2}{\alpha m}\ln\left(\frac{4k}{\delta}\right)} + \sqrt{\frac{2}{(1-\alpha)m}\ln\left(\frac{4|\mathcal{H}_j|}{\delta}\right)} \\
&= \min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}(h) + \sqrt{\frac{2}{\alpha m}\ln\left(\frac{4k}{\delta}\right)} + \sqrt{\frac{2}{(1-\alpha)m}\ln\left(\frac{4|\mathcal{H}_j|}{\delta}\right)}
\end{aligned}$$

3.3

$$\begin{aligned}
&\epsilon_{est}^{MS} = L_{\mathcal{D}}(h^*) - \min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}(h) \overset{2}{\le} \sqrt{\frac{2}{\alpha m}\ln\left(\frac{4k}{\delta}\right)} + \sqrt{\frac{2}{(1-\alpha)m}\ln\left(\frac{4|\mathcal{H}_j|}{\delta}\right)} \\
&\epsilon_{est}^{S} \overset{1}{\le} \sqrt{\frac{2\ln\left(2|\mathcal{H}_k|/\delta\right)}{m}} \\
\Longrightarrow\ &\frac{\epsilon_{est}^{MS}}{\epsilon_{est}^{S}} = \frac{\sqrt{\frac{2}{\alpha m}\ln\left(\frac{4k}{\delta}\right)} + \sqrt{\frac{2}{(1-\alpha)m}\ln\left(\frac{4|\mathcal{H}_j|}{\delta}\right)}}{\sqrt{\frac{2\ln\left(2|\mathcal{H}_k|/\delta\right)}{m}}} = \sqrt{\frac{\ln\left(\frac{4k}{\delta}\right)}{\alpha\ln\left(\frac{2|\mathcal{H}_k|}{\delta}\right)}} + \sqrt{\frac{\ln\left(\frac{4|\mathcal{H}_j|}{\delta}\right)}{(1-\alpha)\ln\left(\frac{2|\mathcal{H}_k|}{\delta}\right)}}
\end{aligned}$$

כאשר השוויון המסומן ב־1 נובע מסעיף 1 וכנ"ל לגבי 2. שאר המעברים הם אלגבריים. נשים לב ש־$\mathcal{H}_j \subset \mathcal{H}_k$ לכן שני הביטויים שהתקבלו (בשורש) חסומים, כלומר שגיאת ה־estimation בתהליך ה־MS לא יכולה להיות הרבה יותר גרועה מזו בשיטה הרגילה. אפשר גם לראות שאם הופכים את היחס $\left(\frac{\epsilon_{est}^{S}}{\epsilon_{est}^{MS}}\right)$ מקבלים ביטוי שגדל באופן פרופורציוני ליחס בין הגודל של $\mathcal{H}_k$ לגודל של $\mathcal{H}_j$. כלומר, ככל שניקח $\mathcal{H}_k$ גדולה מ־$\mathcal{H}_j$, נקבל ביטוי גדול יותר ל־$\frac{\epsilon^{S}}{\epsilon^{MS}}$.

באופן מפורש, אם ניקח את $j=k$, כלומר ההיפותזה ה"טובה ביותר" מגיעה מ־$\mathcal{H}_k$, נקבל שהחסם בסעיף 1 הדוק יותר מבסעיף 2 ־ כלומר שיטה זו "טובה יותר".



איור 1: אפשר לראות שהפולינום h^* שהותאם בתהליך ה־validation כמעט זהה ל־h_{cv} שהותאם ב־cross-validation

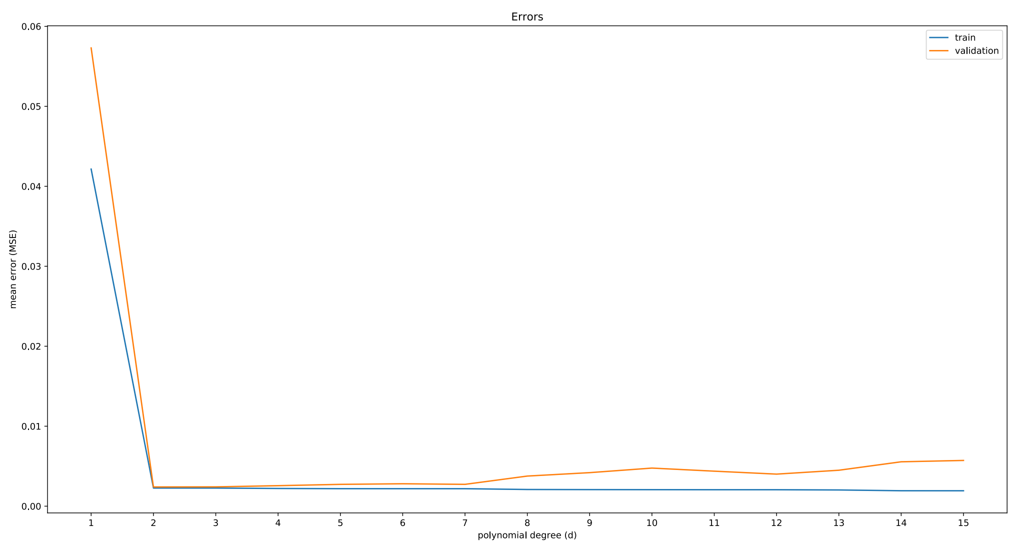
בכיוון השני, ניקח את המחלקה $\mathcal{H}_i$ להיות בגודל $2^{2^{t\cdot i}}$ לכל $i \in [k]$ וקבוע $t \geq 1$. נבחן את החסמים שהתקבלו בסעיפים הקודמים:

$$\begin{aligned}
(S): & L_{\mathcal{D}}\left(h^*\right) \leq \min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}\left(h\right) + \sqrt{\frac{2\ln\left(2\cdot 2^{2^{tk}}/\delta\right)}{m}} = \min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}\left(h\right) + \sqrt{\frac{2\ln\left(2^{1+2^{tk}}/\delta\right)}{m}} \\
(MS): & L_{D}\left(h^*\right) \leq \min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}\left(h\right) + \sqrt{\frac{2}{\alpha m}\ln\left(\frac{4k}{\delta}\right)} + \sqrt{\frac{2}{\left(1-\alpha\right)m}\ln\left(\frac{2^{2+2^{tj}}}{\delta}\right)} \\
\Longrightarrow & \frac{\epsilon_{est}^{S}}{\epsilon_{est}^{MS}} = \frac{\sqrt{\frac{2\ln\left(2^{1+2^{tk}}/\delta\right)}{m}}}{\sqrt{\frac{2}{\alpha m}\ln\left(\frac{4k}{\delta}\right)} + \sqrt{\frac{2}{(1-\alpha)m}\ln\left(\frac{2^{2+2^{tj}}}{\delta}\right)}} \xrightarrow[t\to\infty]{} \infty
\end{aligned}$$

כלומר במקרה זה MS טוב בהרבה מהשיטה הרגילה.

4 חלק תכנותי - Validation

- שגיאת ההיפותזה h^* שהתקבלה על נתוני ה־test בתהליך הולידציה היא: ≈ 0.00226
- שגיאת ההיפותזה h_{cv} שהתקבלה על נתוני ה־test בתהליך הקרוס־ולידציה היא: ≈ 0.00225 (כמעט זהה)
- תהליך ה־5-fold cross-validation החזיר פולינום מדרגה 2 (זהה לולידציה רגילה) עם מקדמים דומים מאוד, כפי שאפשר לראות באיור 1



איור 2: ככל שדרגת הפולינום גדלה, שגיאת האימון קטנה אך שגיאת הולדיציה עולה קצת (בגלל overfitting). עבור פולינום מדרגה 1 ברור שיש underfitting ולכן גם שגיאת האימון וגם הולידציה גדולות.