

Fondamenti di Machine Learning

Laurea Triennale in Ingegneria delle Comunicazioni

2: Probabilità, algebra lineare, ottimizzazione

Lecturer: S. Scardapane



SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

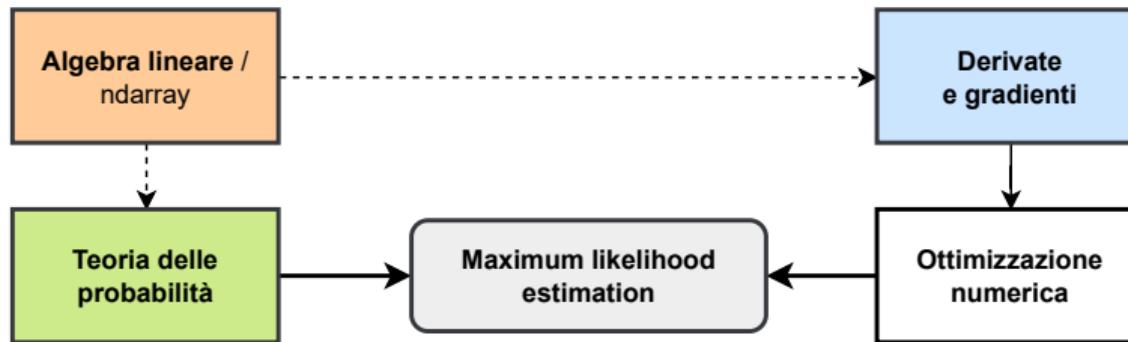


Figure 1: Schema delle varie sezioni della lezione.

Algebra lineare

Array in NumPy

In NumPy, un **ndarray** (o **array**) è una collezione di oggetti dello stesso *tipo* (es., interi, floating-point, caratteri). Ciascun elemento dell'array è indicizzabile con n valori.

Un array X è descritto da:

- ▶ n (a volte chiamato impropriamente *rank*, o *rango*);
- ▶ il tipo dei suoi elementi (es., interi);
- ▶ il suo **shape**, es., (4, 5, 2) è un array contenente 40 valori.

Ci sono vari modi di inizializzare un array, es.:

```
1 import numpy as np
2 X = np.asarray([2, 1]) # Da una lista o altro oggetto Python
3 X = np.random.randn(4, 5, 2) # `Random' 3-dimensional array
4 X = np.zeros((3, 3)) # Matrice di soli zero
```

Nel terzo caso, la dimensione viene passata come una tupla di valori (si notino le due parentesi consecutive).

Estrarre singoli valori (o sottoinsiemi dell'array, **slice**) viene detto **indicizzare** l'array. Alcuni esempi:

```
1 X = np.random.randn(4, 5, 2)
2 X[0, 3, 1] # Indicizzazione completa (da zero)
3 X[0] # Indicizzazione parziale (slice), di dimensioni (5, 2)
4 X[0:2, 0] # Indicizzazione parziale, di dimensioni (2, 2)
5 # ...
```

Per quanto riguarda le slide, useremo $X_{i,j,k}$ o X_{ijk} o $[X]_{i,j,k}$ per indicizzare un array, usando le stesse convenzioni che in NumPy.

Visualizzare l'indicizzazione

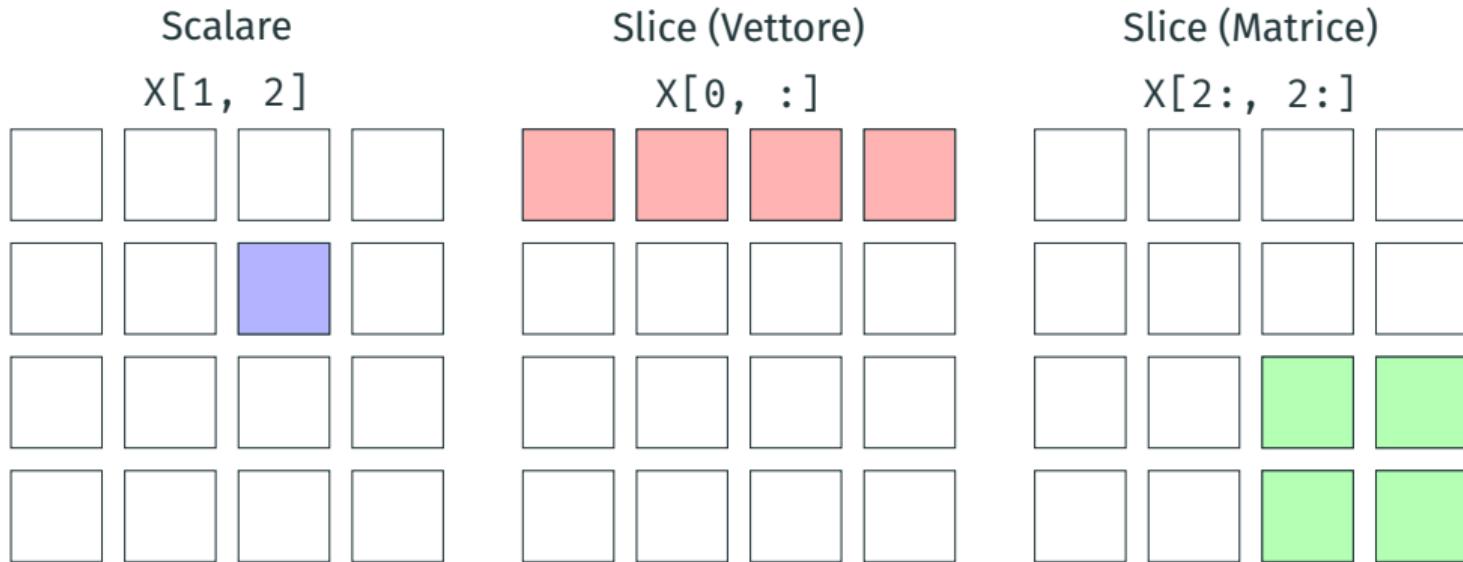


Figure 2: Esempi visivi di operazione di indicizzazione e slicing su un array bidimensionale.

Numerose operazioni in NumPy si applicano *element-wise*, ad ogni elemento separatamente:

```
1 X = np.random.randn(4, 5)
2 Y = np.random.randn(4, 5)
3 Z = X + np.sin(Y) # Zij = Xij + sin(Yij)
```

A volte scriviamo operazioni che appaiono inconsistenti:

```
1 X = np.random.randn(4, 5)
2 y = np.random.randn(5)
3 Z = X + y # Output shape: (4, 5)
```

Questo va interpretato come $Z_i = X_i + y$ (**broadcasting**).

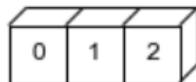
Il broadcasting permette di eseguire operazioni tra array di forme diverse se rispettano queste regole:

1. Gli shape vengono allineati a partire da **destra** verso sinistra.
2. Se un array ha meno dimensioni dell'altro, il suo shape viene esteso a sinistra con degli **1** (**padding**).
3. Due dimensioni sono compatibili se:
 - ▶ sono **uguali**;
 - ▶ oppure una delle due è **1**.

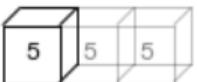
Se queste condizioni non sono verificate, NumPy solleva un **ValueError**.

Regole di broadcasting

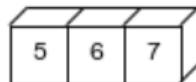
`np.arange(3)+5`



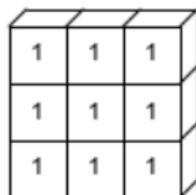
+



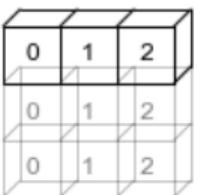
=



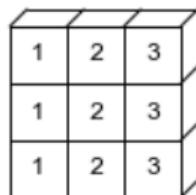
`np.ones((3, 3))+np.arange(3)`



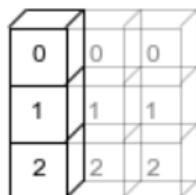
+



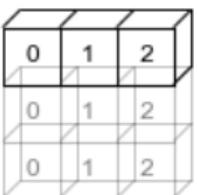
=



`np.arange(3).reshape((3, 1))+np.arange(3)`



+



=

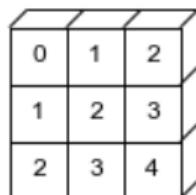


Figure 3: Esempi di broadcasting in NumPy.

Consideriamo questa porzione di codice:

```
1 a = np.random.randn(3)
2 b = np.random.randn(3)
3
4 # Sum of errors squared
5 e = ((a - b)**2).sum()
6
7 # *WRONG* sum of errors squared
8 e = ((a.reshape((3,1)) - b.reshape((1,3)))**2).sum()
```

A causa del brodcasting, oggetti con dimensioni (3,), (3,1), o (1,3) sono fondamentalmente diversi.

Algebra lineare

Vettori e matrici

Un array 0-dimensionale viene detto uno **scalare**. Un array 1-dimensionale è invece, nella terminologia dell'algebra lineare, un **vettore** (e lo denotiamo in grassetto):

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}^\top = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_m]$$

Possiamo interpretare un vettore come un punto nello spazio (o, equivalentemente, come il segmento che collega l'origine a quel punto).

Possiamo sommare tra loro due vettori (regola del parallelogramma):

$$\mathbf{z} = a\mathbf{x} + b\mathbf{y}, \quad z_i = ax_i + by_i.$$

La *lunghezza* del vettore (norma ℓ_2 , la distanza dall'origine), è data da:

$$\|\mathbf{x}\|^2 = \sum_i x_i^2. \quad (1)$$

Il **prodotto scalare** (dot product) tra due vettori è invece dato da:

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \sum_i x_i y_i = \mathbf{x}^\top \mathbf{y}.$$

Geometricamente, il prodotto scalare è legato all'angolo θ tra i due vettori (**cosine similarity**):

$$\cos(\theta) = \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle}{\|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|}. \quad (2)$$

Per due vettori **ortogonali**, $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = 0$. Altrimenti, la cosine similarity oscilla tra -1 (vettori opposti) e $+1$ (vettori allineati).

La norma Euclidea si può riscrivere in funzione dei prodotti scalari:

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2 = \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle + \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle - 2\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle.$$

Array 2-dimensionali sono detti **matrici**:

$$X = \begin{bmatrix} X_{1,1} & \cdots & \cdots & \cdots & X_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ X_{m,1} & \cdots & \cdots & \cdots & X_{m,n} \end{bmatrix}$$

n columns

m rows

Numericamente, una matrice può essere interpretata come un **batch** (insieme) di vettori:

$$X = \begin{bmatrix} X_1 \\ \vdots \\ X_m \end{bmatrix}, \quad X = [X_{:,1} \quad \dots \quad X_{:,n}]$$

Il prodotto tra una matrice $W \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ed un vettore $a \in \mathbb{R}^n$ produce un vettore $b \in \mathbb{R}^m$:

$$\begin{matrix} b & = & W & a \\ (m) & & (m,n) & (n) \end{matrix} .$$

Ogni elemento di b è il prodotto scalare tra la riga corrispondente di W ed il vettore a :

$$b_i = \langle W_{i,:}, a \rangle = \sum_{j=1}^n W_{ij} a_j .$$

In alternativa, possiamo esprimere b come una **combinazione lineare** delle colonne di W :

$$b = \sum_{j=1}^n a_j w_{:,j} = a_1 w_{:,1} + \cdots + a_n w_{:,n} .$$

Una matrice $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ può essere interpretata come una **funzione** (o mappa) $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$:

$$f(x) = Ax$$

Questa mappa è **lineare**, ovvero rispetta il principio di sovrapposizione:

$$f(au + bv) = af(u) + bf(v)$$

Molte operazioni che vedremo nel corso (es. un layer di una rete neurale) sono fondamentalmente trasformazioni lineari (o quasi-lineari) di questo tipo.

L'insieme di tutti i possibili output di una mappa lineare $f(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x}$ viene detto l'**immagine** della funzione.

Poiché $\mathbf{A}\mathbf{x}$ è una combinazione lineare delle colonne di \mathbf{A} , l'immagine coincide con lo **span** (lo spazio generato) dalle sue colonne:

$$\text{im}(\mathbf{A}) = \mathcal{C}(\mathbf{A}) = \text{span}(\mathbf{a}_{:,1}, \dots, \mathbf{a}_{:,n})$$

Questo viene chiamato lo **spazio delle colonne** (column space) della matrice. Se le colonne sono linearmente indipendenti, esse formano una base per questo spazio.

Possiamo combinare linearmente due matrici: $Z = aX + bY$. Generalizzando il prodotto scalare, possiamo anche definire una moltiplicazione tra matrici.

Il **prodotto matriciale** $Z = XY$ tra X e Y è definito come:

$$(a,b) \quad (b,c)$$

$$Z_{i,j} = \langle X_i, Y_{:,j} \rangle = \sum_z X_{iz} Y_{zj} \in \mathbb{R}^{a \times c}.$$

In questa forma, ogni riga di Z è il prodotto matrice-vettore tra X ed una colonna di Y , ovvero $Z_{:,j} = X Y_{:,j}$.

Se consideriamo una matrice come un batch di vettori, abbiamo che:

$$\mathbf{XW} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_m \end{bmatrix} \mathbf{W} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1\mathbf{W} \\ \vdots \\ \mathbf{x}_m\mathbf{W} \end{bmatrix} \quad (3)$$

Una singola moltiplicazione tra matrici è equivalente ad m prodotti vettori-matrici. Questo tipo di operazioni sono molto importanti in quanto le operazioni in NumPy sono estremamente ottimizzate rispetto ad, es., un for-loop.

Un altro esempio: \mathbf{XX}^T è una matrice contenente tutti i prodotti scalari $\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle$.

Teoria delle probabilità

Regole base della probabilità

Consideriamo questo esempio (riprodotto da Bishop, 2006):

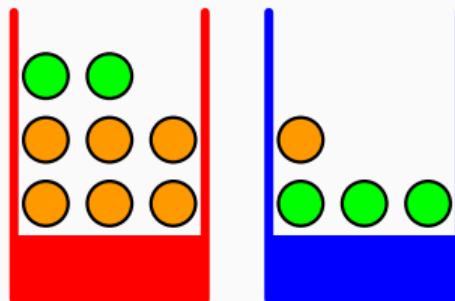


Figure 4: Abbiamo due scatole con diverse proporzioni di palline arancioni e verdi, provenienti da due scatole (rossa e blu). Possiamo chiederci “Qual è la probabilità di estrarre una pallina verde?”, oppure “Qual è la probabilità di aver estratto dalla prima scatola, dato che il colore della pallina è arancione?”.

Definiamo una variabile C che può prendere i valori *verde* ed *arancione*. La probabilità che una pallina estratta sia di un dato colore è data da:

$$p(C = \text{'verde'}) = 5/12 \quad (4)$$

$$p(C = \text{'arancione'}) = 7/12 \quad (5)$$

$p(C)$ definisce una *distribuzione di probabilità* sui valori di C , e rispetta le seguenti proprietà:

$$p(C = c) \geq 0, \sum_c p(C = c) = 1.$$

Questa viene detta l'interpretazione *frequentista* della probabilità.

Ora consideriamo una seconda variabile, B , che descrive la scatola (*blu* o *rossa*). Una **distribuzione di probabilità congiunta** coinvolge le due variabili insieme:

$$p(C = \text{'verde'}, B = \text{'blu'}) = 2/12.$$

La *regola della somma* delle probabilità ci permette di *marginalizzare* (rimuovere) una delle due variabili:

$$p(C = c) = \sum_b p(C = c, B = b).$$

Ad esempio, $p(C = \text{'verde'}) = p(C = \text{'verde'}, B = \text{'rossa'}) + p(C = \text{'verde'}, B = \text{'blu'}) = 2/12 + 3/12 = 5/12$.

La **distribuzione di probabilità condizionale** $p(C | B)$ definisce la probabilità di osservare una variabile aleatoria C se conosciamo il valore di un'altra variabile B . Ad esempio (sempre contando le palline):

$$p(C = \text{'verde'} | B = \text{'rossa'}) = 2/8.$$

La *regola del prodotto* delle probabilità mette in relazioni le probabilità congiunte e condizionali:

$$p(C = c, B = b) = p(B = b)p(C = c | B = b) = p(C = c)p(B = b | C = c).$$

Possiamo semplificare la notazione evitando di scrivere esplicitamente i valori delle variabili. Ricapitolando tutti gli assiomi fondamentali di una distribuzione di probabilità:

$$p(C) \geq 0 \quad [\text{Una probabilità è sempre positiva}]$$

$$\sum_C p(C) = 1 \quad [\text{La somma delle probabilità è 1}]$$

$$p(C) = \sum_B p(C, B) \quad [\text{Regola della somma}]$$

$$p(C, B) = p(B)p(C | B) \quad [\text{Regola del prodotto}]$$

Se $p(C, B) = p(C)p(B)$, C e B sono dette **indipendenti**.

Combinando invece la regola della somma e del prodotto, otteniamo la **regola di Bayes**:

$$p(B | C) = \frac{p(C | B)p(B)}{p(C)}.$$

Dove $p(C) = \sum_B p(C | B)p(B)$. Possiamo interpretare questa regola in vari modi: tra le altre cose, ci permette di aggiornare la nostra conoscenza di B data da $p(B)$ dopo aver osservato un evento C .

Teoria delle probabilità

Distribuzioni di probabilità continue

Consideriamo ora il caso di una variabile x che può assumere valori continui (es., l'altezza di una persona). In questo caso, possiamo definire una **funzione di densità di probabilità (probability density function)** $p(x)$ definita come:

$$p(x \in [a, b]) = \int_a^b p(x)dx . \quad (6)$$

Tale funzione deve rispettare:

$$p(x) \geq 0, \quad \int p(x)dx = 1.$$

In particolare, la **distribuzione di probabilità cumulativa (cumulative probability distribution)** è data da:

$$P(x) = \int_{-\infty}^x p(y)d(y) \quad (7)$$

da cui $p(x) = P'(x)$. Riotteniamo le regole viste prima in maniera simile:

$$p(x) = \int p(x | y)p(y)dy \quad (8)$$

$$p(x, y) = p(x | y)p(y) \quad (9)$$

$$p(y | x) = \frac{p(x | y)p(y)}{\int_y p(x | y)p(y)dy} \quad (10)$$

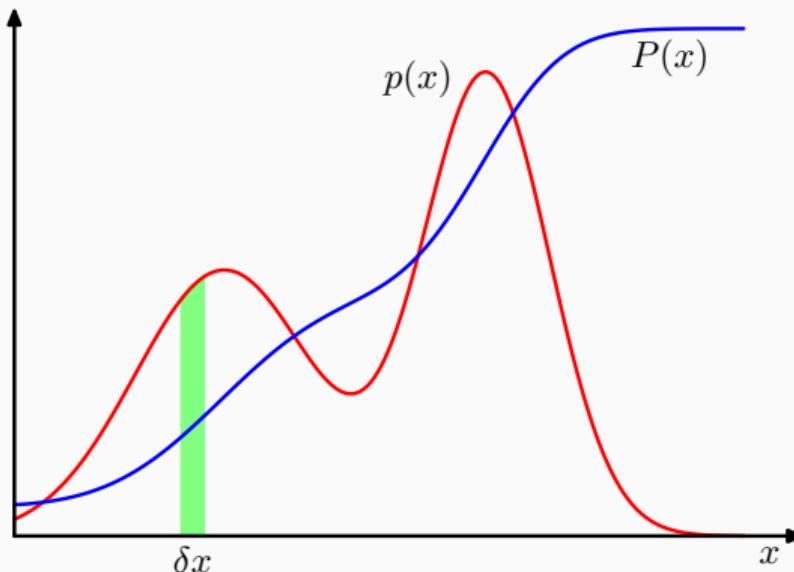


Figure 5: Riprodotta da (Bishop e Bishop, 2023).

Teoria delle probabilità

Manipolare le probabilità

Il **valore atteso** di una funzione $f(x)$ è dato da:

$$\mathbb{E}[f(x)] = \sum_x f(x)p(x).$$

In particolare, la **media** è il valore atteso di $f(x) = x$:

$$\mathbb{E}[x] = \sum_x xp(x)$$

Ad esempio, se vinciamo $x = 1$ per palline verdi e $x = 2$ per palline arancioni, la vincita media è data da $\mathbb{E}[x] = 5/12 + 2 * 7/12 \approx 1.6$.

La **varianza** di x è invece definita come lo spostamento quadratico medio rispetto alla media:

$$\text{Var}(x) = \mathbb{E} [(x - \mathbb{E}[x])^2] = \mathbb{E}[x^2] - \mathbb{E}[x]^2 \quad (11)$$

Ritornando all'esempio delle palline, la varianza ci permette di calcolare quanto potrebbero variare le nostre vincite individuali su varie ripetizioni.

Il valore atteso ha due proprietà fondamentali:

- ▶ **Linearità:** $\mathbb{E}[aX + b] = a\mathbb{E}[X] + b$, per ogni $a, b \in \mathbb{R}$.
- ▶ **Additività:** $\mathbb{E}[X + Y] = \mathbb{E}[X] + \mathbb{E}[Y]$, anche se X e Y **non sono indipendenti**.

Queste proprietà rendono il valore atteso molto semplice da manipolare nei modelli di ML, dove spesso lavoriamo con somme di variabili casuali.

Se lanciamo due dadi equi D_1 e D_2 , qual è la somma attesa $S = D_1 + D_2$?

- ▶ Sappiamo che $\mathbb{E}[D_1] = \mathbb{E}[D_2] = \frac{1+2+3+4+5+6}{6} = 3.5$.
- ▶ Per l'additività:

$$\mathbb{E}[D_1 + D_2] = \mathbb{E}[D_1] + \mathbb{E}[D_2] = 3.5 + 3.5 = 7.$$

Nota bene: non abbiamo avuto bisogno di calcolare la tabella di probabilità di tutte le 36 possibili combinazioni della somma!

La **covarianza** misura quanto due variabili x e y variano insieme:

$$\text{Cov}(x, y) = \mathbb{E}[(x - \mathbb{E}[x])(y - \mathbb{E}[y])] = \mathbb{E}[xy] - \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[y] \quad (12)$$

Se x e y sono indipendenti, $\text{Cov}(x, y) = 0$.

Spesso normalizziamo la covarianza per ottenere la **correlazione** $\rho \in [-1, 1]$:

$$\rho_{xy} = \frac{\text{Cov}(x, y)}{\sqrt{\text{Var}(X)\text{Var}(Y)}}$$

Esempio: dipendenza tra variabili

Città	Temp. (X)	Gelati (Y)	Termosifoni (Z)
A	10	100	500
B	20	200	300
C	30	300	100

- ▶ X e Y hanno **covarianza positiva** (al crescere della temperatura crescono i consumi di gelato).
- ▶ X e Z hanno **covarianza negativa** (al crescere della temperatura diminuiscono i riscaldamenti).

A differenza del valore atteso, la varianza **non è lineare**:

- ▶ $\text{Var}(aX + b) = a^2\text{Var}(X)$.
- ▶ $\text{Var}(X + Y) = \text{Var}(X) + \text{Var}(Y) + 2\text{Cov}(X, Y)$.

Se X e Y sono indipendenti (e quindi $\text{Cov}(X, Y) = 0$), la varianza della somma è la somma delle varianze.

Esempio numerico: Se triplichiamo una variabile ($Y = 3X$), la sua varianza aumenta di **9 volte**.

Supponiamo di non avere accesso a $p(x)$ (non possiamo guardare dentro le scatole), ma possiamo campionare valori $x \sim p(x)$ (estrarre una pallina). Con un sufficiente numero di campioni possiamo stimare il valore atteso:

$$\mathbb{E}[f(x)] = \sum_x f(x)p(x) \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i) \quad (13)$$

dove x_1, \dots, x_n sono i campioni. Questo viene detto **metodo di Monte Carlo**.

Teoria delle probabilità

Distribuzioni di probabilità parametriche

Un concetto che useremo ripetutamente è quello di **one-hot encoding** (o **one-of- k encoding**, o **dummy encoding**).

Consideriamo una variabile discreta $x \in \{1, \dots, k\}$. Il suo one-hot encoding è un vettore $\mathbf{x} \in \{0, 1\}^k$ tale che:

$$x_i = \begin{cases} 1 & \text{se } x = i \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (14)$$

Consideriamo $x \in \{\text{'verde'}, \text{'blu'}, \text{'arancione'}\}$. L'encoding diventa:

$$\text{'verde'} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \text{'blu'} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \text{'arancione'} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (15)$$

Il dummy encoding permette di trasformare una variabile categorica in un vettore, senza imporre un ordinamento tra gli elementi.

Raggruppiamo le probabilità associate ad x in un vettore $\mathbf{p} = [p_1, \dots, p_k]^T$. Possiamo descrivere l'intera distribuzione di probabilità in maniera concisa come:

$$\text{Cat}(\mathbf{x}; \mathbf{p}) = \prod_{i=1}^k p_i^{x_i} = p_1^{x_1} p_2^{x_2} \cdots p_k^{x_k}, \quad (16)$$

dove \mathbf{x} è il dummy encoding di x . Scritta in questa forma, viene detta una **distribuzione categorica**. La notazione $\text{Cat}(\mathbf{x}; \mathbf{p})$ chiarisce che \mathbf{p} sono gli unici parametri necessari a specificare interamente la distribuzione stessa: vengono detti **sufficient statistic**.

Nel caso di variabili aleatorie continue, una distribuzione molto comune è quella **Gaussiana**:

$$p(x) = \mathcal{N}(x; \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right)^2\right) \quad (17)$$

Questa rappresenta una distribuzione centrata in μ (la **media**), che decresce sui lati in maniera simmetrica con uno spread che dipende da σ^2 (la **varianza** della distribuzione).

Visualizzazione della distribuzione Gaussiana

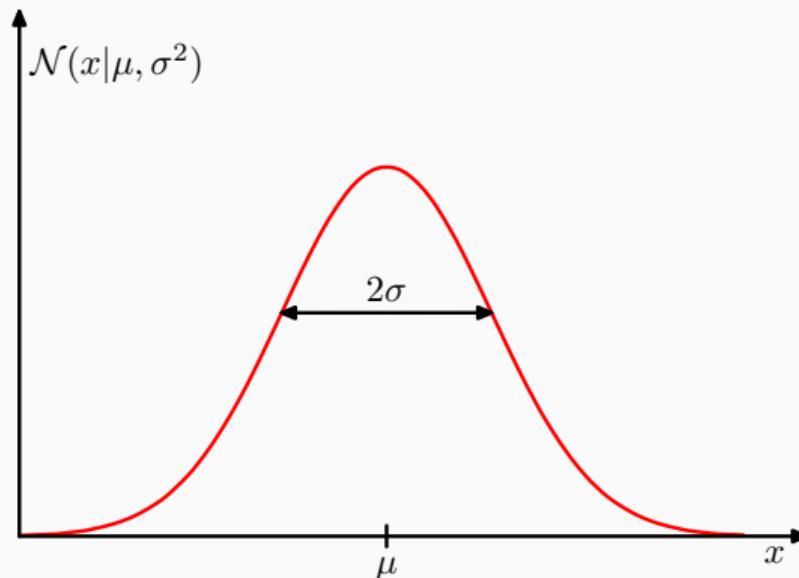


Figure 6: Riprodotto da (Bishop e Bishop, 2023).

Teoria delle probabilità

Maximum likelihood

Supponiamo di non conoscere $p(x)$, ma di avere accesso ad n campioni $\{x_i\}$, $x_i \sim p(x)$.

Abbiamo però l'intuizione che la distribuzione abbia una forma $f(x; s)$, di cui non conosciamo però le statistiche sufficienti s . Il principio del **maximum likelihood** (massima verosimiglianza) ci permette di stimare questi valori, se assumiamo che essi siano stati campionati in maniera indipendente l'uno dall'altro.

Essendo i campioni indipendenti, possiamo scrivere una distribuzione congiunta fattorizzata:

$$p(x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n f(x_i; s) \quad (18)$$

Banalmente, i parametri ottimi sono quelli che massimizzano questa quantità:

$$s^* = \arg \max_s \prod_{i=1}^n f(x_i; s) \quad (19)$$

Se n è grande, produttorie di tantissimi elementi possono essere instabili a livello numerico. In questo caso, possiamo definire la **log-likelihood** come il logaritmo della likelihood:

$$\log p(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n \log f(x_i; s) \quad (20)$$

Poiché il logaritmo è monotono, massimizzare la log-likelihood è equivalente a massimizzare la likelihood:

$$s^* = \arg \max_s \sum_{i=1}^n \log f(x_i; s) \quad (21)$$

Vedremo più avanti che possiamo risolvere problemi di ottimizzazione di questo tipo tramite **discesa al gradiente**. Consideriamo prima due esempi semplici di stima ML (per le derivazioni si veda (Bishop e Bishop, 2023)).¹

Consideriamo una distribuzione categorica. Otteniamo:

$$p_i = \frac{\sum_{j=1}^n [x_i]_j}{n} \quad (22)$$

che non è altro che la frazione di valori i osservati tra gli n campionati.

Consideriamo ora una Gaussiana. Possiamo riscrivere la log-likelihood come:

$$L(\mu, \sigma^2) = -\frac{n}{2} \log(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2 \quad (23)$$

Da cui otteniamo (utile esercizio provarci):

$$\mu^* = \frac{1}{n} \sum_i x_i \quad (24)$$

$$\sigma^{2*} = \frac{1}{n} \sum_i (x_i - \mu^*)^2 \quad (25)$$

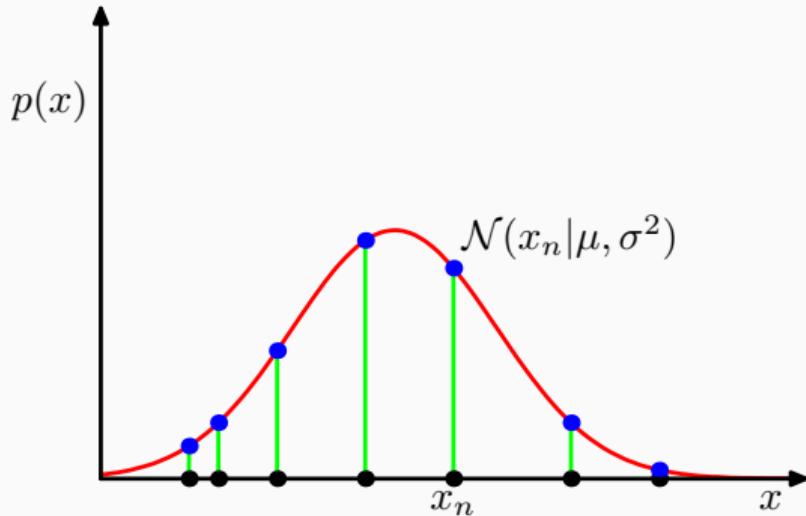


Figure 7: Riprodotta da (Bishop e Bishop, 2023). Trovare la media ottima (secondo il principio della massima verosimiglianza) vuol dire scegliere μ tale da minimizzare il quadrato della somma dei segmenti verdi.

Ottimizzazione numerica

Derivate e gradienti

Consideriamo una funzione $f(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Sotto certe condizioni, possiamo studiarne l'andamento tramite la sua derivata.

La **derivata** di una funzione $f(x)$ è definita come:

$$\partial f(x) = f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x + h) - f(x)}{h}. \quad (26)$$

Anche per una funzione continua, non è detto che la derivata sia definita ovunque.

La derivata descrive come varia $f(x)$ per uno spostamento ‘infinitesimo’ rispetto ad x .

Derivata di un polinomio:

$$\partial [x^p] = px^{p-1}.$$

Derivata di funzioni esponenziali e logaritmi:

$$\partial [\exp(x)] = \exp(x),$$

$$\partial [\log(x)] = \frac{1}{x}.$$

Le derivate possiedono numerose proprietà algebriche, tra cui:

- Linearità:

$$\partial[f(x) + g(x)] = f'(x) + g'(x).$$

- Regola del prodotto:

$$\partial[f(x)g(x)] = f'(x)g(x) + f(x)g'(x),$$

- Chain rule (regola della composizione)

$$\partial[f(g(x))] = f'(g(x))g'(x).$$

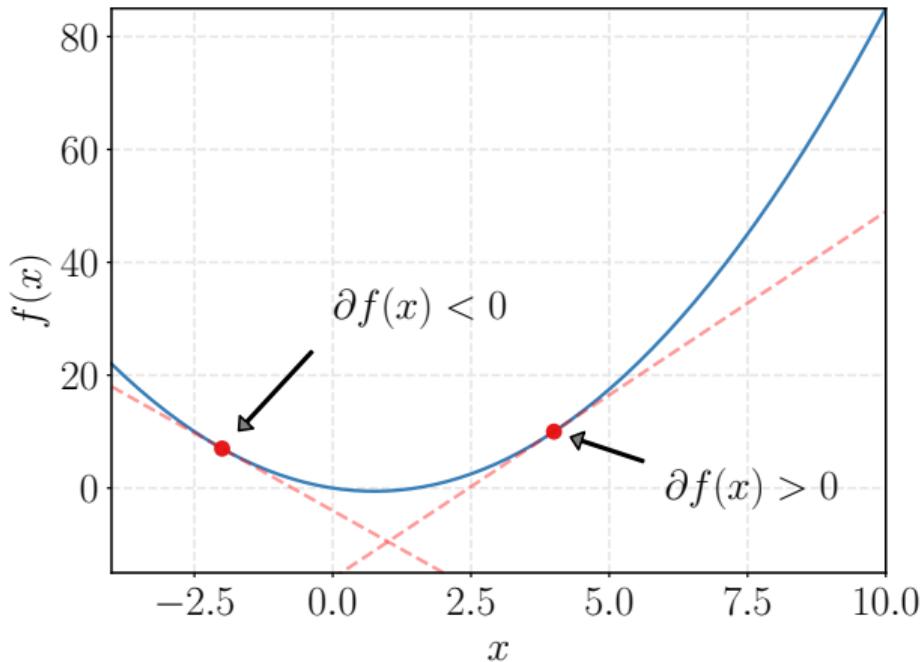


Figure 8: $f(x) = x^2 - 1.5x$. La derivata in ogni punto può essere interpretata come la pendenza della linea tangente in quel punto.

Per una funzione $y = f(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$, il **gradiente** $\partial f(\mathbf{x})$ è un vettore m -dimensionale:

$$[\partial f(\mathbf{x})]_i = \frac{\partial y}{\partial x_i} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(\mathbf{x} + h\mathbf{e}_i) - f(\mathbf{x})}{h}, \quad (27)$$

dove \mathbf{e}_i è il vettore:

$$[\mathbf{e}_i]_j = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

A volte useremo la notazione $\nabla f(\mathbf{x})$ per indicare il gradiente.

Più in generale, la **derivata direzionale** di $f(\mathbf{x})$ lungo una direzione \mathbf{v} è data da:

$$D_{\mathbf{v}}f(\mathbf{x}) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(\mathbf{x} + h\mathbf{v}) - f(\mathbf{x})}{h}, \quad (28)$$

Si può provare la seguente identità (informalmente, il movimento si decomponne rispetto agli assi):

$$D_{\mathbf{v}}f(\mathbf{x}) = \langle \nabla f(\mathbf{x}), \mathbf{v} \rangle. \quad (29)$$

Nel caso più generale $\mathbf{y} = f(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$:

Lo **Jacobian** $\partial f(\mathbf{x})$ di f è definito come:

(n,m)

$$\partial f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_1}{\partial x_m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_n}{\partial x_m} \end{pmatrix}. \quad (30)$$

Per $n = 1$ otteniamo il gradiente, per $m = n = 1$ otteniamo la derivata.

Prodotto scalare:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{y}.$$

Moltiplicazione di un vettore e di una matrice:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}.$$

Gradiente della norma:

$$\partial \|\mathbf{x}\|^2 = 2\mathbf{x}.$$

Si veda come riferimento:
<https://www.math.uwaterloo.ca/~hwolkowi/matrixcookbook.pdf>.

Quasi tutte le regole delle derivate si estendono al caso multi-variato, ad esempio (linearità):

$$\partial(f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x})) = \partial f(\mathbf{x}) + \partial g(\mathbf{x}) \quad (31)$$

Esiste anche una chain rule: date $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ e $g : \mathbb{R}^o \rightarrow \mathbb{R}^m$, con $\mathbf{h} = g(\mathbf{x})$:

$$\begin{matrix} \partial [f(g(\mathbf{x}))] &= \partial f(\mathbf{h}) \partial g(\mathbf{x}) \\ (n,o) & (n,m) \quad (m,o) \end{matrix} \quad (32)$$

In parole: lo Jacobiano della composizione è il prodotto (matriciale) dei due Jacobiani individuali.

Data una funzione $f(\mathbf{x}_0)$ valutata in \mathbf{x}_0 , la funzione:

$$\tilde{f}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + \langle \partial f(\mathbf{x}_0), \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \rangle \quad (33)$$

è la miglior **approssimazione lineare** di f rispetto a \mathbf{x}_0 (**teorema di Taylor**). Considerando derivate di ordini superiori è possibile migliorare la qualità dell'approssimazione.

```
1 # Function
2 f = lambda x: x**2 - 1.5*x
3
4 # Derivative (manual)
5 df = lambda x: 2*x - 1.5
6
7 # Linearization at 0.5
8 x = 0.5
9 f_linearized = lambda h: f(x) + df(x)*(h - x)
10
11 print(f(x + 0.01)) # -0.5049
12 print(f_linearized(x + 0.01)) # -0.5050
```

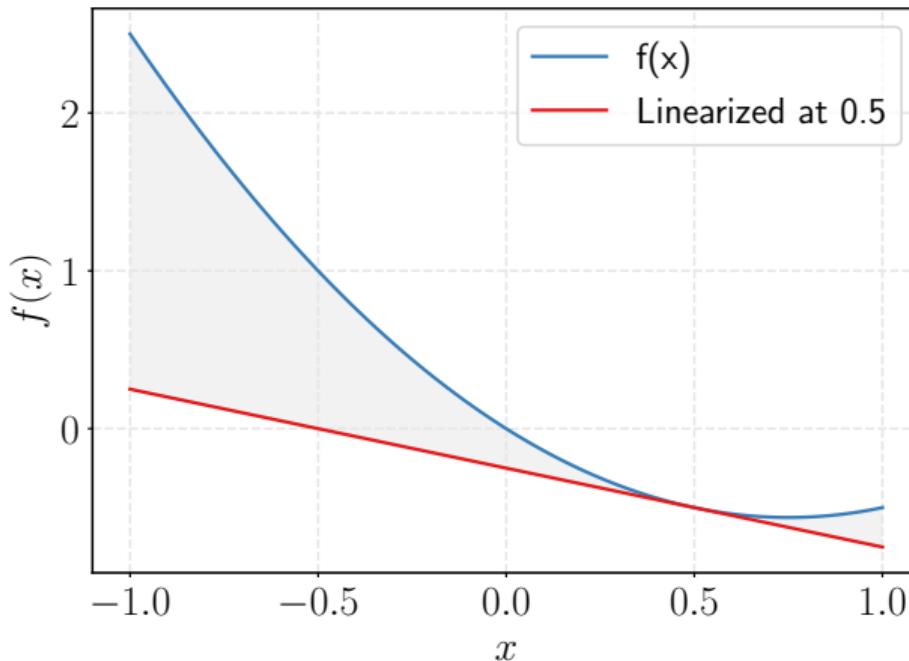


Figure 9: Funzione ($f(x) = x^2 - 1.5x$), linearizzata in 0.5.

Ottimizzazione numerica

Discesa al gradiente

Consideriamo nuovamente un problema di questo tipo:

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d} f(\mathbf{x}) \quad (34)$$

Si tratta di un problema di **ottimizzazione (non vincolata)** nel dominio \mathbb{R}^d .
Massimizzare rispetto a minimizzare è una scelta stilistica, in quanto:

$$\mathbf{x}^* = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d} f(\mathbf{x}) = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d} -f(\mathbf{x}) \quad (35)$$

Il maximum likelihood è un esempio di tale problema (se la likelihood è differenziabile).

Un punto \mathbf{x} per il quale $f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}') \quad \forall \mathbf{x}' \in \mathbb{R}^d$ viene detto un **minimo globale**. In maniera meno restrittiva, invece, se:

$$f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}') \quad \forall \mathbf{x}' \in \{\mathbf{x}' : \|\mathbf{x}' - \mathbf{x}\|^2 < \varepsilon\} \quad (36)$$

per qualche $\varepsilon > 0$, allora il punto viene detto un **minimo locale**.

Se $\nabla f(\mathbf{x}) = 0$, \mathbf{x} il punto viene detto **stazionario**. Come vedremo, i punti stazionari possono essere minimi, massimi, oppure **punti di sella**.

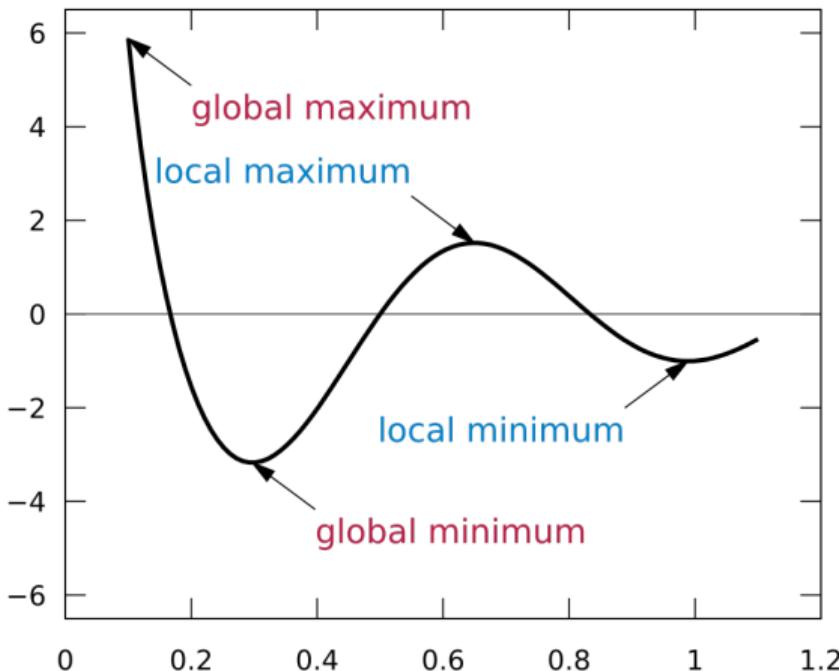


Figure 10: Senza nessuna informazione aggiuntiva, un punto stazionario può essere un **minimo**, un **massimo**, e può essere **locale** o **globale** (Wikimedia, KSmrq).

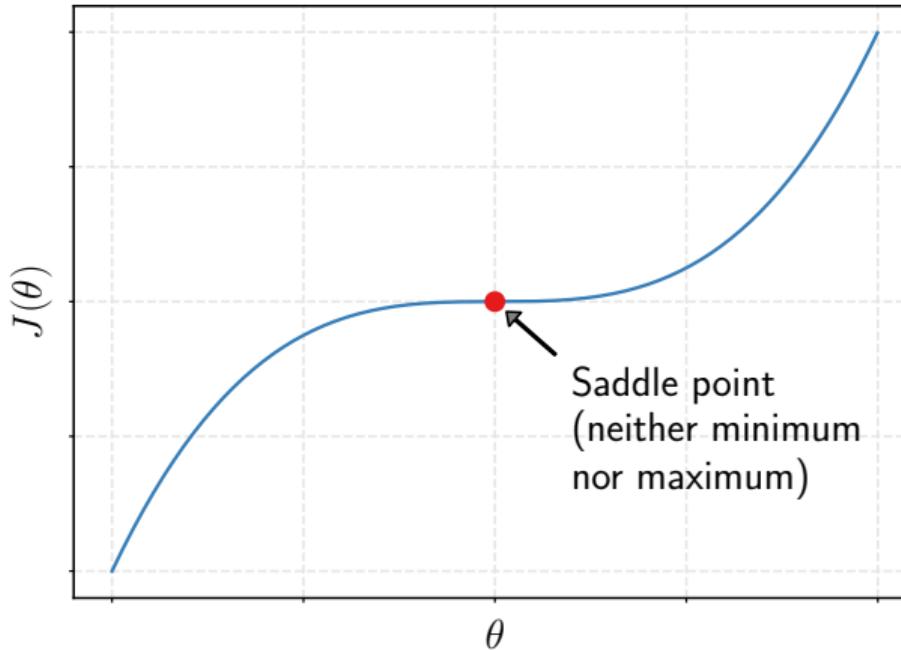


Figure 11: I punti stazionari possono essere anche **punti di sella**, che crescono e decrescono in direzioni diverse.

Consideriamo un punto (scelto casualmente) \mathbf{x}_0 , ed un algoritmo iterativo in cui ad ogni istante ci muoviamo in una direzione \mathbf{p}_t per una lunghezza η_t :

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_{t-1} + \eta_t \mathbf{p}_t . \quad (37)$$

\mathbf{p}_t è chiamata una **descent direction** in $f(\mathbf{x}_{t-1})$ se $f(\mathbf{x}_t) < f(\mathbf{x}_{t-1})$ per qualche η_t , anche molto piccolo. η_t viene detto **step size** o **learning rate**.

Poiché \mathbf{p}_t descrive solo la direzione del movimento, possiamo assumere che $\|\mathbf{p}_t\| = 1$. Possiamo quantificare il cambiamento (infinitesimo) dello spostamento con la derivata direzionale:

$$D_{\mathbf{p}_t} f(\mathbf{x}_{t-1}) = \langle \nabla f(\mathbf{x}_{t-1}), \mathbf{p}_t \rangle = \|\nabla f(\mathbf{x}_{t-1})\| \underbrace{\|\mathbf{p}_t\|}_{=1} \cos(\theta) = \|\nabla f(\mathbf{x}_{t-1})\| \cos(\theta).$$

Dall'equazione si vede che la discesa è massima quando $\cos(\theta) = -1$, cioè quando $\theta = \pi$ e $\mathbf{p}_t = -\nabla f(\mathbf{x}_{t-1})$. Questa viene chiamata la **steepest descent direction**. In generale, qualsiasi direzione tale per cui $\cos(\theta) < 0$ è una descent direction.

Un algoritmo iterativo in cui scegliamo sempre di muoverci nella steepest descent direction viene detto **discesa al gradiente**.

La discesa al gradiente trova un punto stazionario di una funzione $f(\cdot)$ tramite la seguente procedura iterativa:

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_{t-1} - \eta_t \nabla f(\mathbf{x}_{t-1}) . \quad (38)$$

Il concetto di **convessità** è essenziale nell'ottimizzazione. Se una funzione è convessa, la sua ottimizzazione è più semplice in quanto non esistono minimi locali.

f è convessa se per $\lambda \in [0, 1]$:

$$f((1 - \lambda)\mathbf{x}_1 + \lambda\mathbf{x}_2) \leq (1 - \lambda)f(\mathbf{x}_1) + \lambda f(\mathbf{x}_2). \quad (39)$$

Se questo vale sempre in maniera stretta, f viene detta **strettamente convessa** (strictly convex).

Visualizzazione della convessità di una funzione

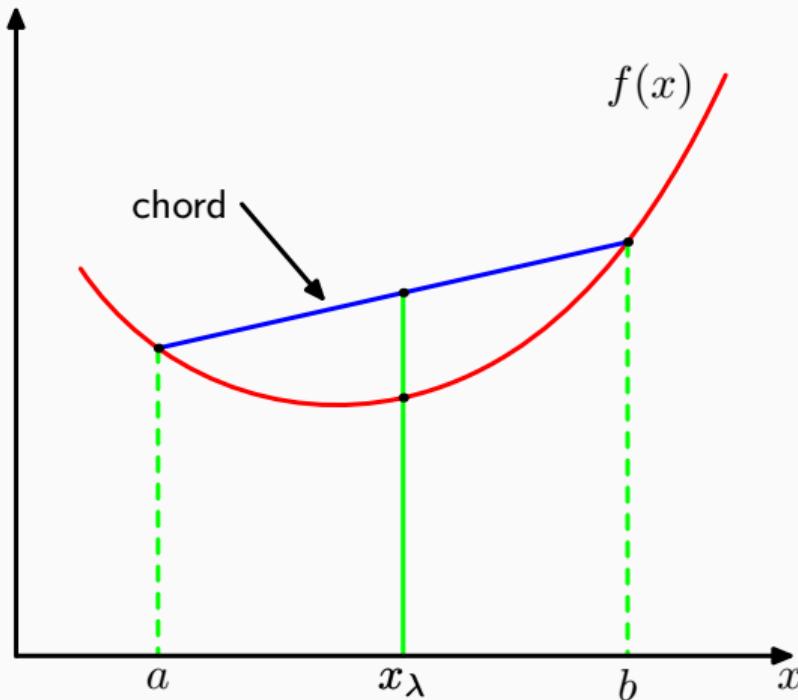


Figure 12: Riprodotto da (Bishop e Bishop, 2023).

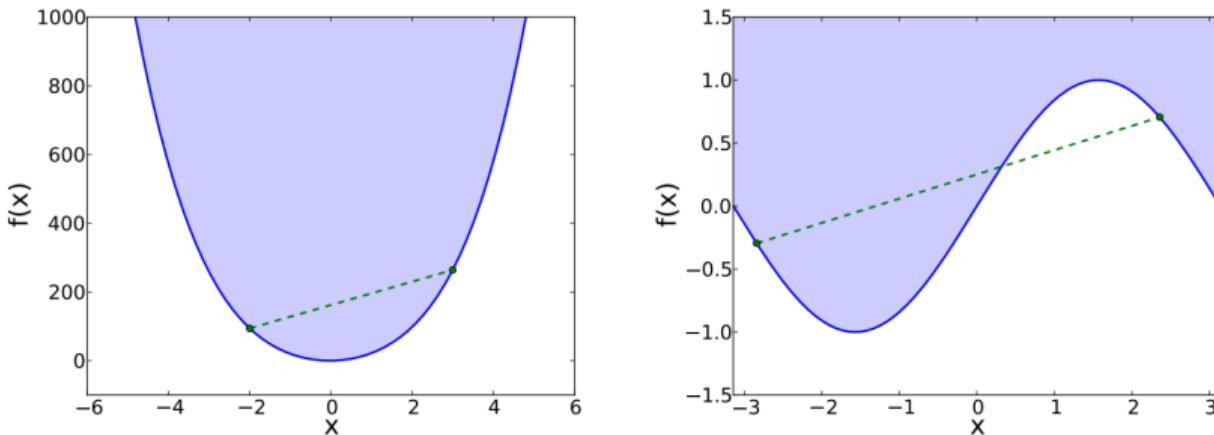


Figure 13: Sinistra: un esempio di funzione convessa. Destra: un esempio di funzione non convessa. Riprodotto da “An Introduction to Machine Learning” by Smola and Vishwanathan [unpublished].

Consideriamo una funzione $f(x)$, e supponiamo la discesa al gradiente converga ad un punto x^* . Allora:

- ▶ Se $f(x)$ è non convessa: il punto è stazionario.
- ▶ Se $f(x)$ è convessa: il punto è un minimo globale.
- ▶ Se $f(x)$ è strettamente convessa: il punto è l'unico minimo globale.

Per una funzione non convessa questo risultato non può essere migliorato (informalmente: l'unico modo di trovare un ottimo globale è inizializzare la discesa al gradiente da *qualsiasi* punto dello spazio).