Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών
ΔΠΜΣ «Επιστήμη Δεδομένων και Μηχανική Μάθηση»

Μηχανική Μάθηση

1ο εξάμηνο | ακαδημαϊκό έτος 2022-2023

Θάνος Βουλόδημος
Επ. Καθηγητής ΣΗΜΜΥ ΕΜΠ

Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης (Support Vector Machines)

Ταξινόμηση προτύπων

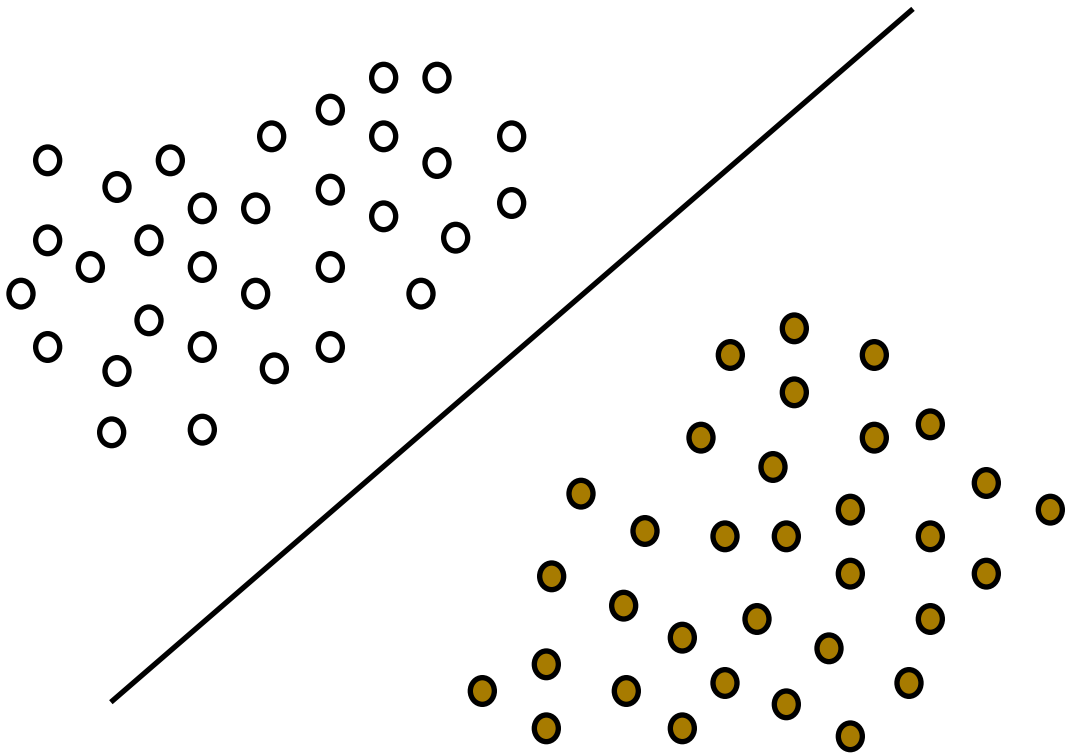
Προβλήματα στην ταξινόμηση με νευρωνικά δίκτυα

- Η ταξινόμηση με perceptrons δουλεύει μόνο με γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Η ταξινόμηση με δίκτυα MLP υποφέρει από βραδεία εκπαίδευση

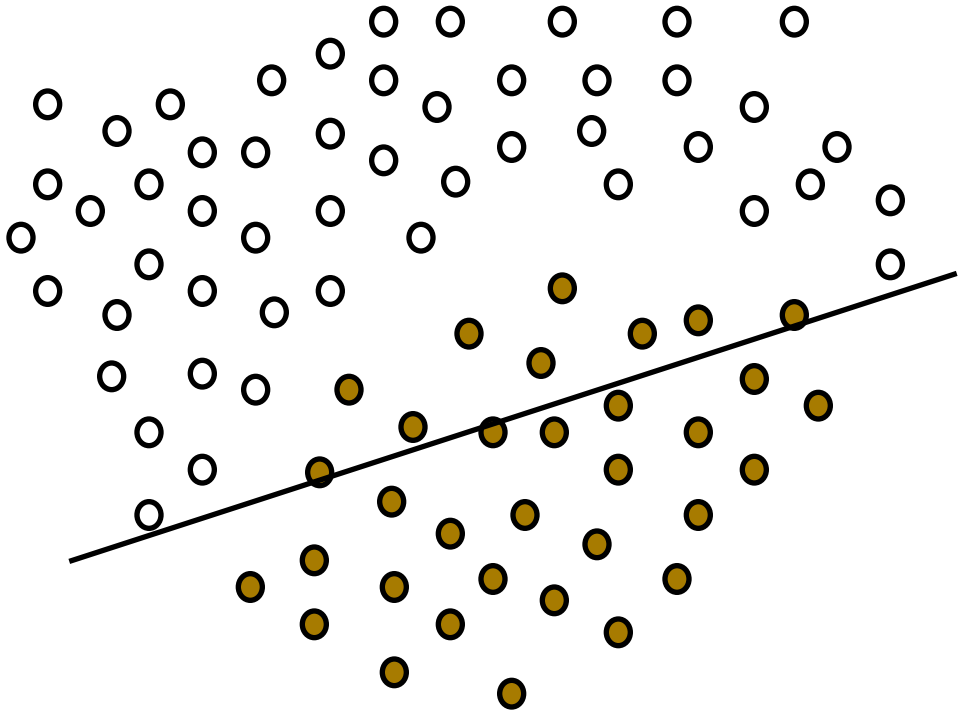
Ιδέα

- Αν επικεντρωθούμε στο πρόβλημα της ταξινόμησης μπορούμε να πετύχουμε καλύτερους χρόνους εκπαίδευσης και καλύτερες ιδιότητες γενίκευσης

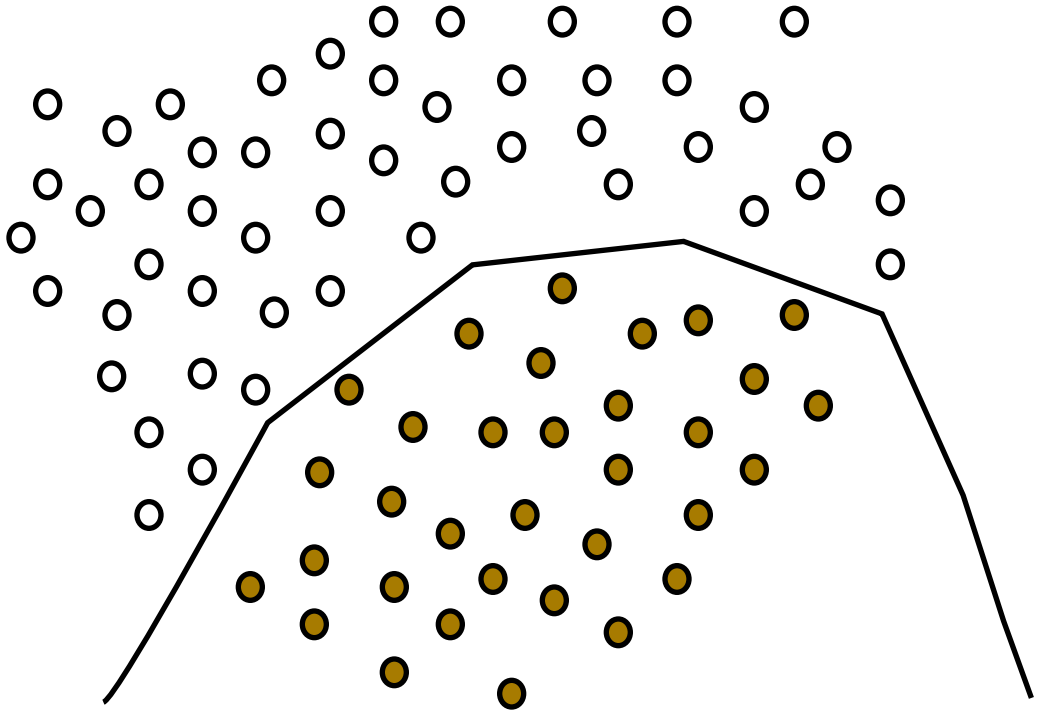
Το πρόβλημα της ταξινόμησης



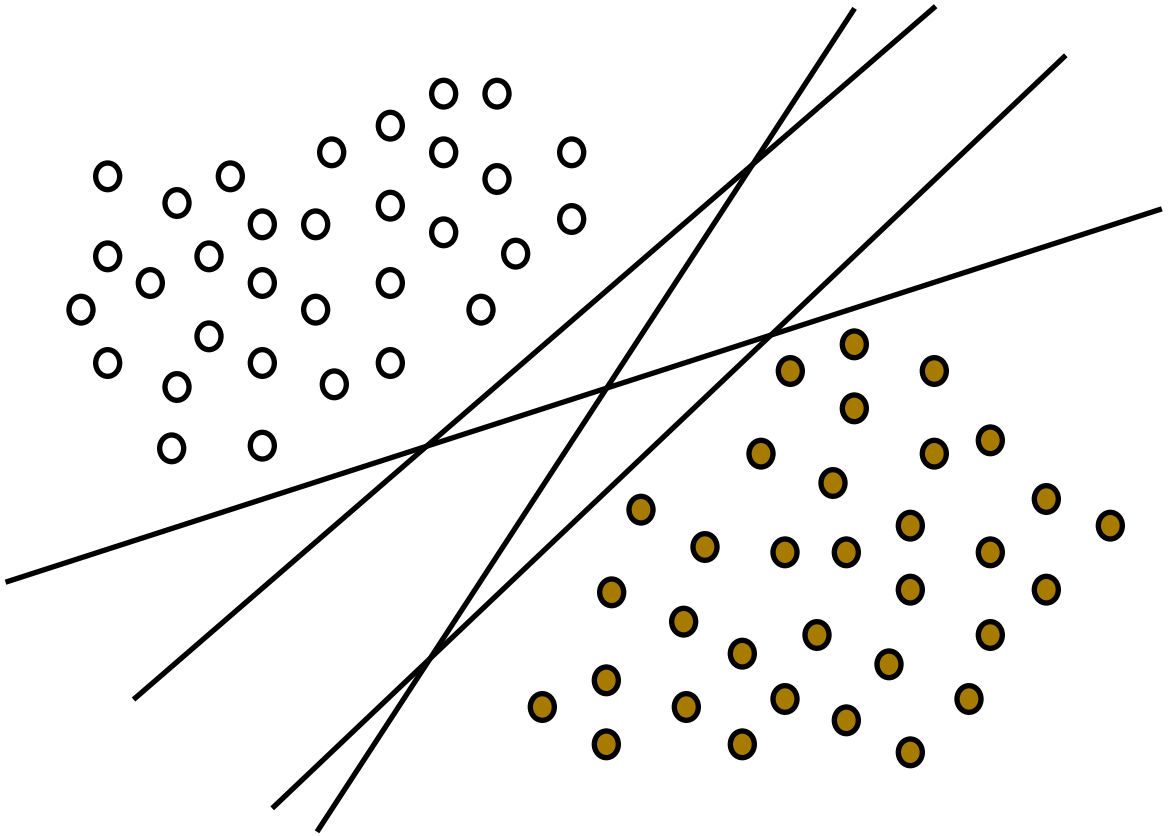
Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις



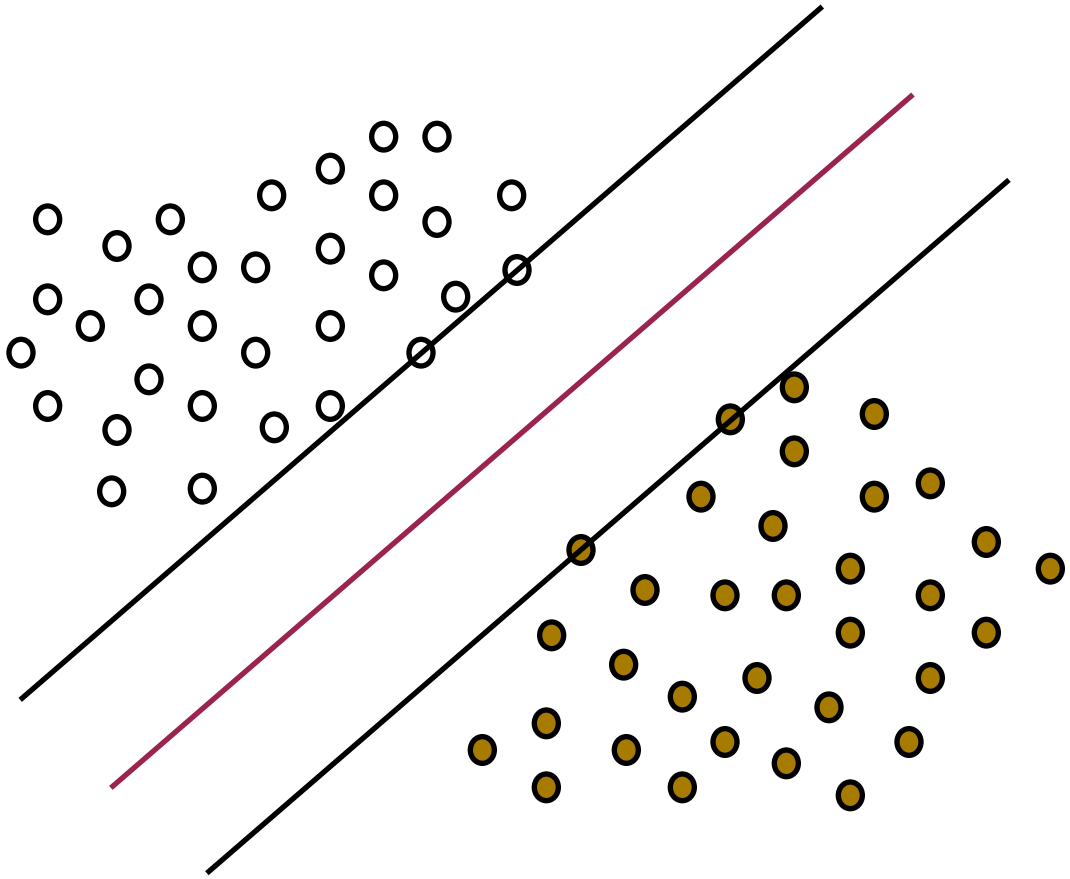
Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις



Ευθείες διαχωρισμού



Βέλτιστη ευθεία διαχωρισμού



Τυπικός ορισμός προβλήματος

Διατύπωση προβλήματος

Δίνεται ένα σύνολο ζευγών $(\mathbf{x}_1, d_1), \ldots, (\mathbf{x}_p, d_p)$
με $d_i = -1$ αν $\mathbf{x}_i \in \mathcal{C}_o$ και $d_i = 1$ αν $\mathbf{x}_i \in \mathcal{C}_1$

Ζητάμε την εύρεση των βαρών $\mathbf{w}$ και του κατωφλίου w_o, έτσι ώστε:
$\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + w_o \geq 0$ αν $d_i = 1$ $(\mathbf{x}_i \in \mathcal{C}_o)$
$\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + w_o < 0$ αν $d_i = -1$ $(\mathbf{x}_i \in \mathcal{C}_1)$

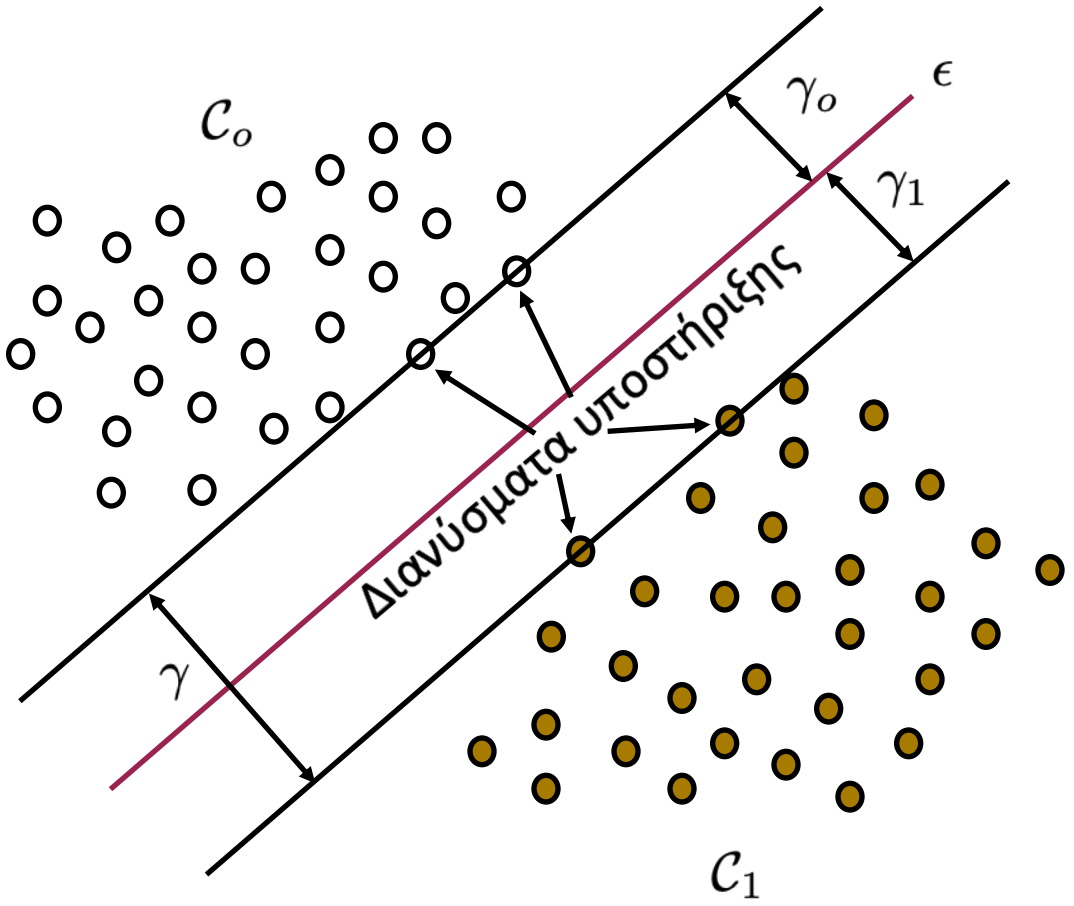
Υπόθεση

Υπάρχει τέτοια ευθεία (οι κλάσεις είναι γραμμικά διαχωρίσιμες)

Απαίτηση

Η ευθεία που θα κατασκευαστεί πρέπει να έχει όσο το δυνατόν *μεγαλύτερο περιθώριο ταξινόμησης*

Βέλτιστο υπερεπίπεδο διαχωρισμού



$$\gamma_o = \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{C}_o} d(\mathbf{x}, \epsilon)$$

$$\gamma_1 = \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{C}_1} d(\mathbf{x}, \epsilon)$$

$$\gamma = \gamma_o + \gamma_1$$

Κανονικό υπερεπίπεδο

$$\gamma_o = \gamma_1$$

$$\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + w_o \geq 1 \text{ αν } \mathbf{x}_i \in \mathcal{C}_o$$
$$\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + w_o \leq \underline{1} \text{ αν } \mathbf{x}_i \in \mathcal{C}_1$$

Επίδραση της κλιμάκωσης

- Παρατηρώ τι συμβαίνει με την κλιμάκωση του $\mathbf{w}$. Για παράδειγμα,
- Αν

$$\mathbf{w}^T\mathbf{x}_k + b \leq -10 \quad \text{όταν } t_k = -1$$
$$\mathbf{w}^T\mathbf{x}_k + b \geq 10 \quad \text{όταν } t_k = 1$$

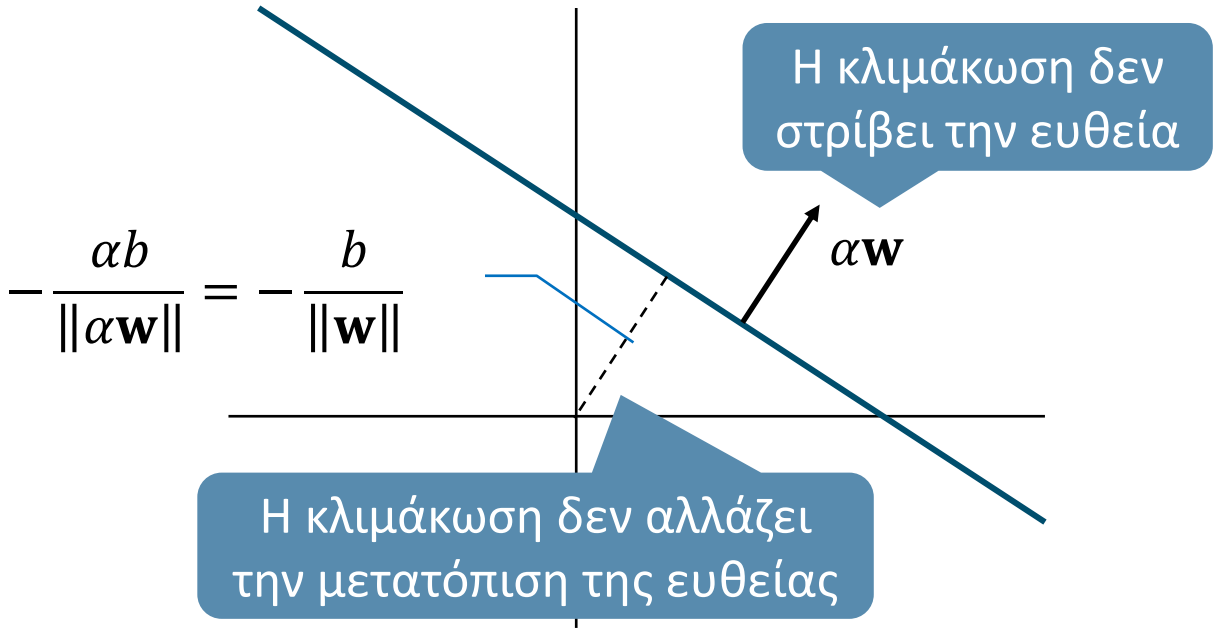
- Τότε

$$2\mathbf{w}^T\mathbf{x}_k + 2b \leq -20 \quad \text{όταν } t_k = -1$$
$$2\mathbf{w}^T\mathbf{x}_k + 2b \geq 20 \quad \text{όταν } t_k = 1 \text{ ,}$$

$$3\mathbf{w}^T\mathbf{x}_k + 3b \leq -30 \quad \text{όταν } t_k = -1$$
$$3\mathbf{w}^T\mathbf{x}_k + 3b \geq 30 \quad \text{όταν } t_k = 1 \text{ , κλπ}$$

Επίδραση της κλιμάκωσης (2)

- Στην ουσία όμως η κλιμάκωση αφήνει την ευθεία στην ίδια θέση



Υπολογισμός περιθωρίου ταξινόμησης

Η συνάρτηση $g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \mathbf{x} + w_o$ ένα μέτρο της απόστασης του **x** από το βέλτιστο υπερεπίπεδο (όπου **w** και w_o τα βέλτιστα βάρη).

Υπολογίζουμε το **x** ως $\mathbf{x} = \mathbf{x}_p + r\frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|}$, όπου r η απόσταση του **x** από το βέλτιστο υπερεπίπεδο

Συνεπώς $g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \left(\mathbf{x} = \mathbf{x}_p + r\frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|}\right) + w_o$

$$\Rightarrow g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_p + w_o + r\frac{\mathbf{w}^\top \mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|}$$

$$\Rightarrow g(\mathbf{x}) = r\frac{\|\mathbf{w}\|^2}{\|\mathbf{w}\|} \Rightarrow r = \frac{g(\mathbf{x})}{\|\mathbf{w}\|}$$

Άρα αφού για τα διανύσματα υποστήριξης έχουμε $g(x) = 1$ ($\mathbf{x}_i \in \mathcal{C}_o$) και $g(x) = -1$ ($\mathbf{x}_i \in \mathcal{C}_1$)

Τελικά: $\boxed{\gamma = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|}}$

Βέλτιστο διαχωριστικό υπερεπίπεδο

Ορισμός προβλήματος βελτιστοποίησης

Υπολόγισε το ελάχιστο της συνάρτησης:

$$\mathcal{J}(\mathbf{w}, w_o) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2$$

υπό τους περιορισμούς των P ανισοτήτων:

$$d_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + w_o) \geq 1,\ i = 1, \ldots, P$$

Παρατηρήσεις

- Η συνάρτηση κόστους είναι κυρτή
- Οι περιορισμοί είναι γραμμικοί

Καλούματε να επιλύσουμε ένα πρόβλημα *τετραγωνικού προγραμματισμού*

Μέθοδος πολλαπλασιαστών Lagrange

Ορίζουμε τη συνάρτηση κόστους:

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}, w_o, \lambda_1, \ldots, \lambda_p) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{P} \lambda_i [d_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + w_o) - 1]$$

με $\lambda_i \geq 0,\ i = 1, \ldots, P$

Η συνάρτηση αυτή πρέπει να ελαχιστοποιηθεί ως προς τα $\mathbf{w}$, w_o και να μεγιστοποιηθεί ως προς τα λ_i

Συνθήκες Karush-Kuhn-Tucker (για το βέλτιστο σημείο)

$$\frac{\partial L}{\partial w_o} = 0 \qquad \frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}} = 0 \qquad \lambda_i [d_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + w_o) - 1] \geq 0,\ i = 1, \ldots, P$$

Βέλτιστη διαχωριστική επιφάνεια

Από τις συνθήκες ΚΚΤ έχουμε:

$$\frac{\partial L}{\partial w_o} = 0 \longrightarrow \sum_{i=1}^{P} \lambda_i d_i = 0$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}} = 0 \longrightarrow \mathbf{w} = \sum_{i=1}^{P} \lambda_i d_i \mathbf{x}_i$$

Συνεπώς η βέλτιστη διαχωριστική επιφάνεια δίνεται από τη σχέση:

$$g^*(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \mathbf{x} + w_o = \sum_{i=1}^{P} \lambda_i d_i \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x} + w_o$$

Βέλτιστη πόλωση

Για τα διανύσματα υποστήριξης ισχύει ότι:

$$d_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + w_o) = 1 \longrightarrow w_o = \frac{1}{d_i} - \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i$$

Για λόγους αριθμητικής ευστάθειας, χρησιμοποιούμε τη σχέση:

$$w_o = \frac{1}{|I_{sv}|} \sum_{i \in I_{sv}} \left(\frac{1}{d_i} - \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i \right)$$

όπου:

$$I_{sv} = \{ i : \mathbf{x}_i \text{ διάνυσμα υποστήριξης } \}$$

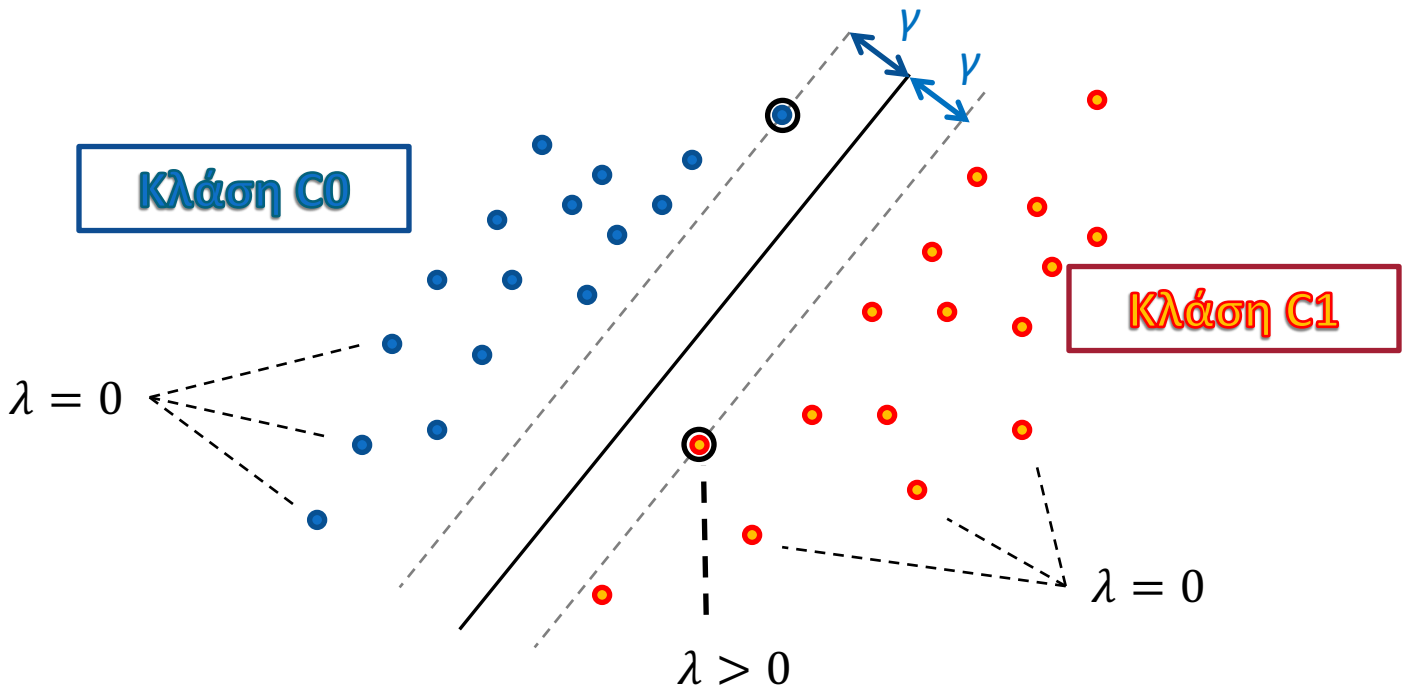
Παρατήρηση

Οι μόνοι πολλαπλασιαστές λ_i που μπορούν να είναι θετικοί είναι αυτοί που αντιστοιχούν σε κάποιο διάνυσμα υποστήριξης $\mathbf{x}_i$.
Για τους υπόλοιπους ισχύει $\lambda_i = 0$.

Ιδιότητες

- Αν το $\mathbf{x}_k$ είναι διάνυσμα υποστήριξης τότε $\lambda_k > 0$:
$$d_k(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_k + w_0) = 1 \Leftrightarrow \lambda_k > 0$$
- Αλλιώς $\lambda_k = 0$:
$$d_k(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_k + w_0) > 1 \Leftrightarrow \lambda_k = 0$$
- Συνεπώς το βέλτιστο **w** είναι **γραμμικός συνδυασμός των διανυσμάτων υποστήριξης και μόνο**

Οι τιμές του λ



Δυϊκό πρόβλημα (1)

Από τα παραπάνω έχουμε:

$$\frac{1}{2}\|w\|^2 = \frac{1}{2}\mathbf{w}^\top\mathbf{w} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{P}\sum_{j=1}^{P}\lambda_i\lambda_j d_i d_j \mathbf{x}_i^\top\mathbf{x}_j$$

$$\sum_{i=1}^{P}\lambda_i[d_i(\mathbf{w}^\top\mathbf{x}_i + w_o) - 1] = \sum_{i=1}^{P}\lambda_i d_i \sum_{j=1}^{P}\lambda_j d_j \mathbf{x}_j^\top\mathbf{x}_i + w_o\sum_{i=1}^{P}\lambda_i d_i - \sum_{i=1}^{P}\lambda_i$$

$$= \sum_{i=1}^{P}\sum_{j=1}^{P}\lambda_i\lambda_j d_i d_j \mathbf{x}_i^\top\mathbf{x}_j - \sum_{i=1}^{P}\lambda_i$$

Επομένως:

$$\mathcal{L}(\lambda_1,\ldots,\lambda_P) = \sum_{i=1}^{P}\lambda_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{P}\sum_{j=1}^{P}\lambda_i\lambda_j d_i d_j \mathbf{x}_i^\top\mathbf{x}_j$$

Δυϊκό πρόβλημα (2)

Ορισμός δυϊκού προβλήματος βελτιστοποίησης

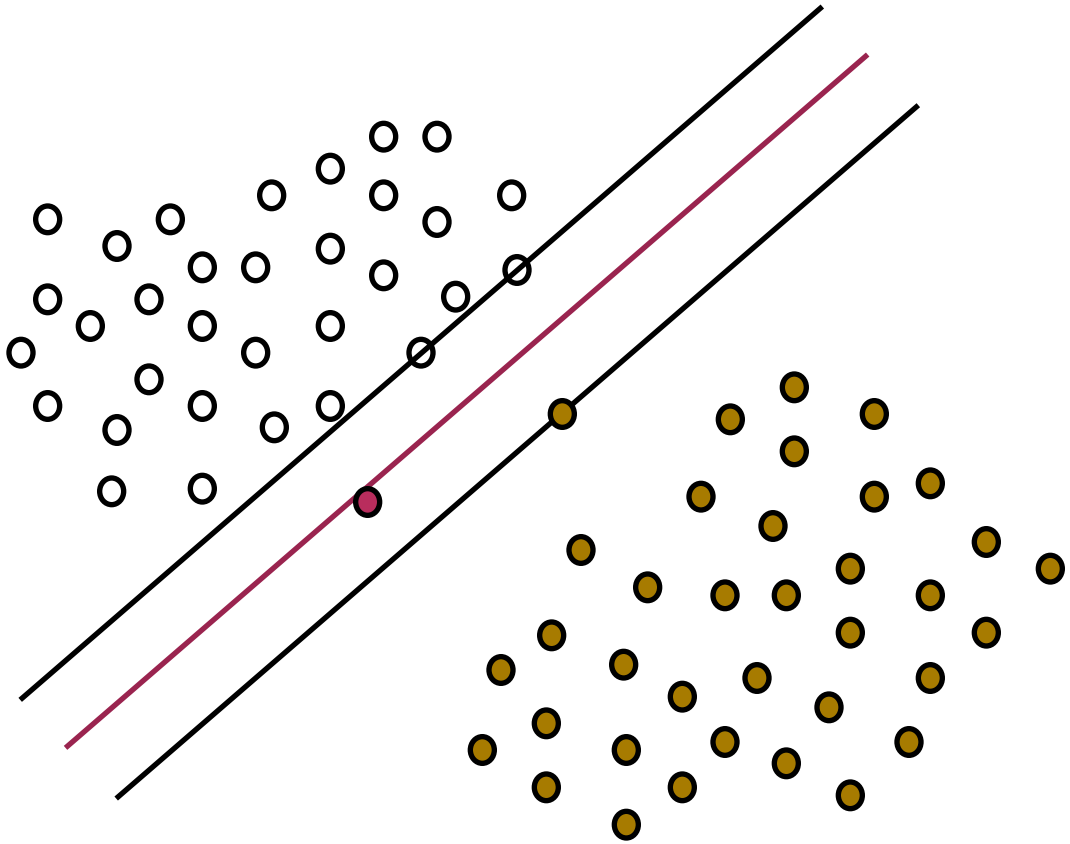
Υπολόγισε το ελάχιστο της συνάρτησης:

$$\mathcal{L}^d(\lambda_1, \ldots, \lambda_P) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{P} \lambda_i \lambda_j d_i d_j \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j - \sum_{i=1}^{P} \lambda_i$$

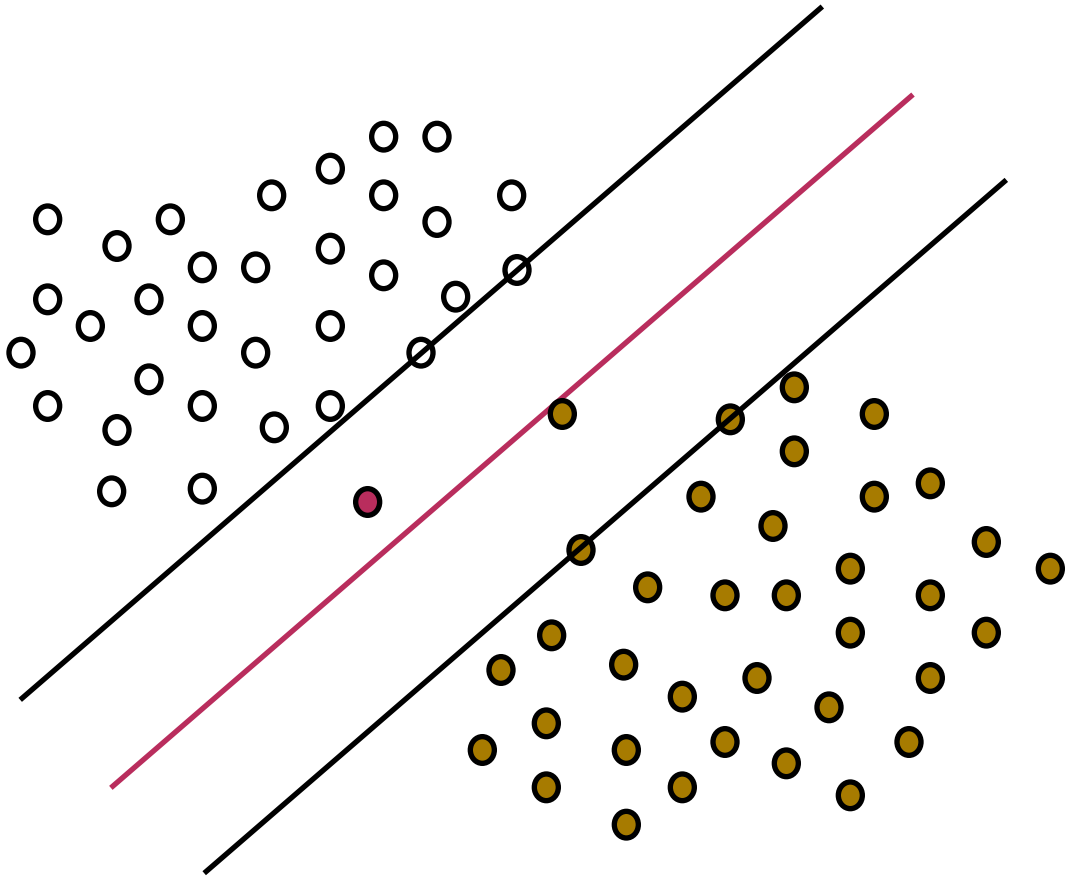
ως προς τα $\lambda_1, \ldots, \lambda_P$, υπό τους περιορισμούς

$$\sum_{i=1}^{P} \lambda_i d_i = 0 \qquad \lambda_i \geq 0,\ i = 1, \ldots, P$$

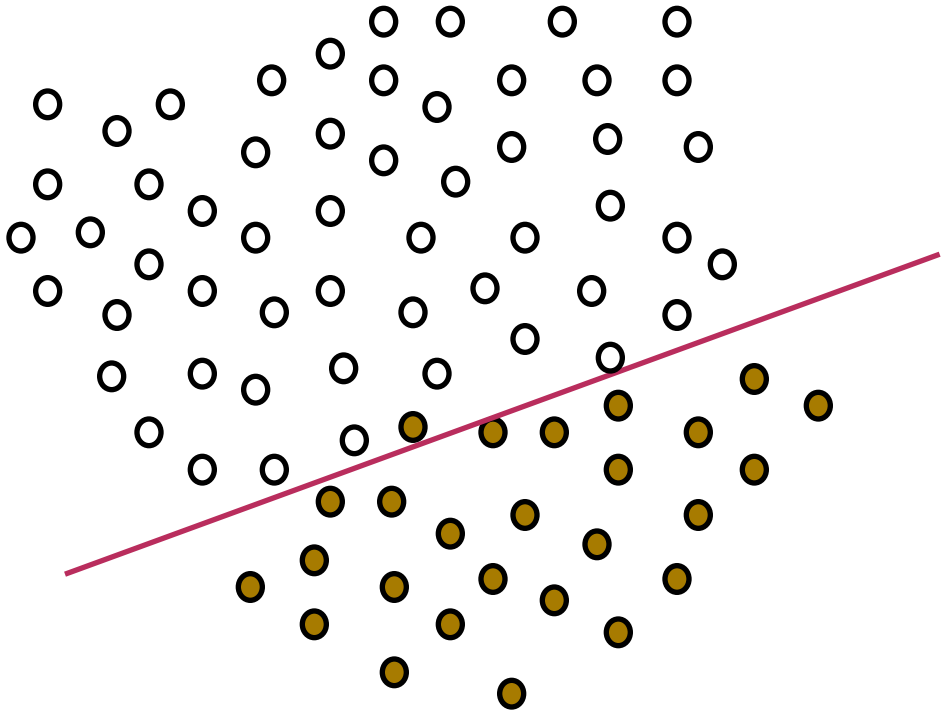
Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις



Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις



Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις



Βέλτιστο υπερεπίπεδο

Μεταβλητές χαλαρότητας

Ορίζουμε ένα σύνολο $\{\xi_i\}_{i=1}^{N}$ από θετικές τιμές και τις εισάγουμε στην εξίσωση της βέλτιστης ευθείας διαχωρισμού ως εξής:

$$d_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + w_o) \geq 1 - \xi_i \ , i = 1, \ldots, P$$

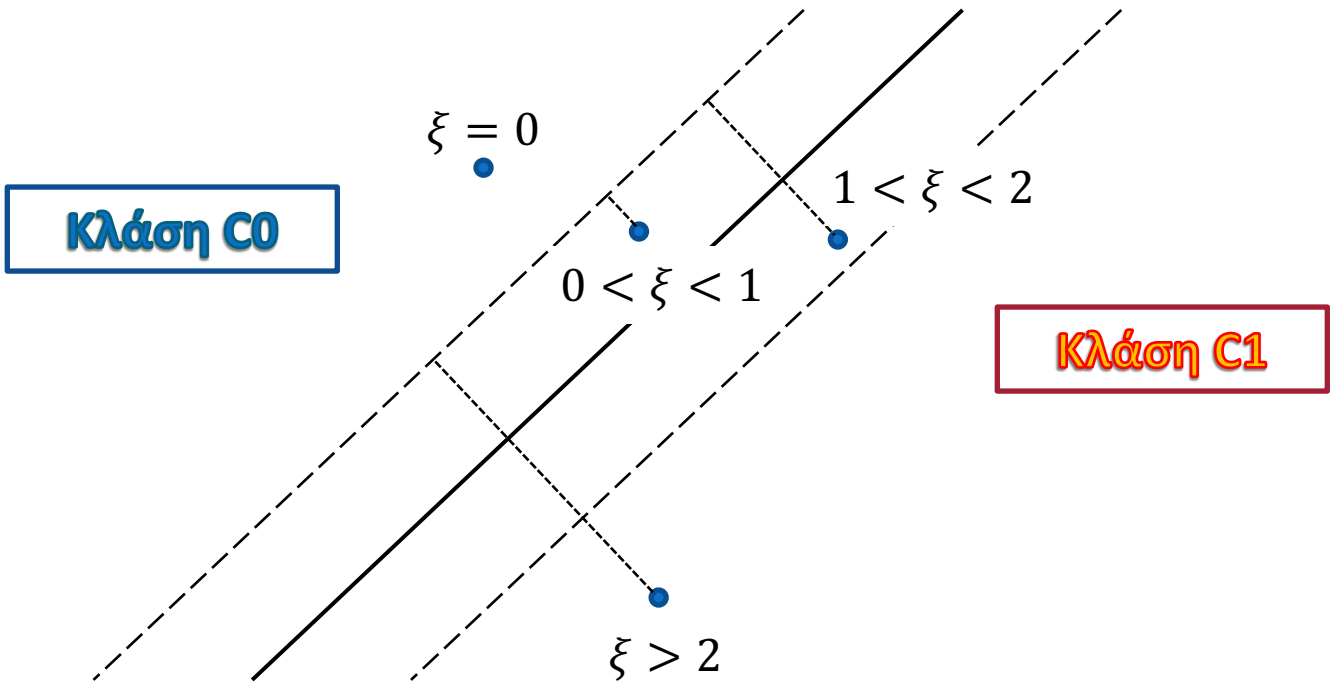
με $\xi_i \geq 0, \ i = 1, \ldots, P$

Παρατηρούμε ότι:

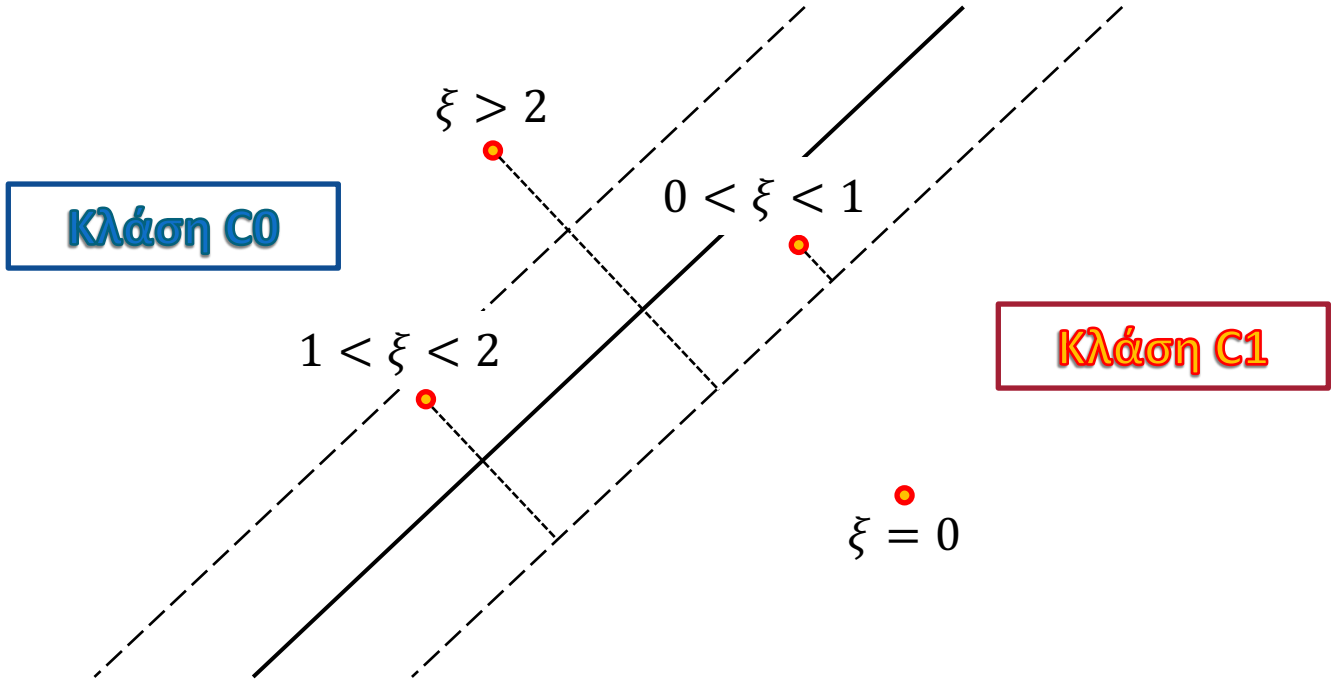
Αν $\xi_i \leq 1$ δεν υπάρχει λάθος ταξινόμηση

Αν $\xi_i > 1$ υπάρχει λάθος ταξινόμηση
και το πρότυπο $\mathbf{x}_i$ ταξινομείται σε λάθος κλάση

Οι μεταβλητές χαλαρότητας



Οι μεταβλητές χαλαρότητας



Βέλτιστο υπερεπίπεδο

Ορισμός προβλήματος βελτιστοποίησης

Υπολόγισε το ελάχιστο της συνάρτησης:

$$\mathcal{J}(\mathbf{w}, w_o) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{P}\xi_i$$

υπό τους περιορισμούς των P ανισοτήτων:

$$d_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + w_o) \geq 1 - \xi_i \ , i = 1, \ldots, P$$

όπου η παράμετρος C επιλέγεται από το χρήστη και είναι το βάρος του κόστους των λάνθασμένων ταξινομήσεων

Αν $C = 0$ τότε αγνοούμε τελείως τις παραμέτρους χαλαρότητας, επομένως δεν μας ενδιαφέρει αν έχουμε λανθασμένες ταξινομήσεις

Αν $C \to \infty$ τότε δίνουμε έμφαση στη σωστή ταξινόμηση των προτύπων

Δυϊκό πρόβλημα

Ορισμός δυϊκού προβλήματος βελτιστοποίησης

Υπολόγισε το ελάχιστο της συνάρτησης:

$$\mathcal{L}_{ns}^{d}(\lambda_1, \ldots, \lambda_P) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{P} \lambda_i \lambda_j d_i d_j \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j - \sum_{i=1}^{P} \lambda_i$$

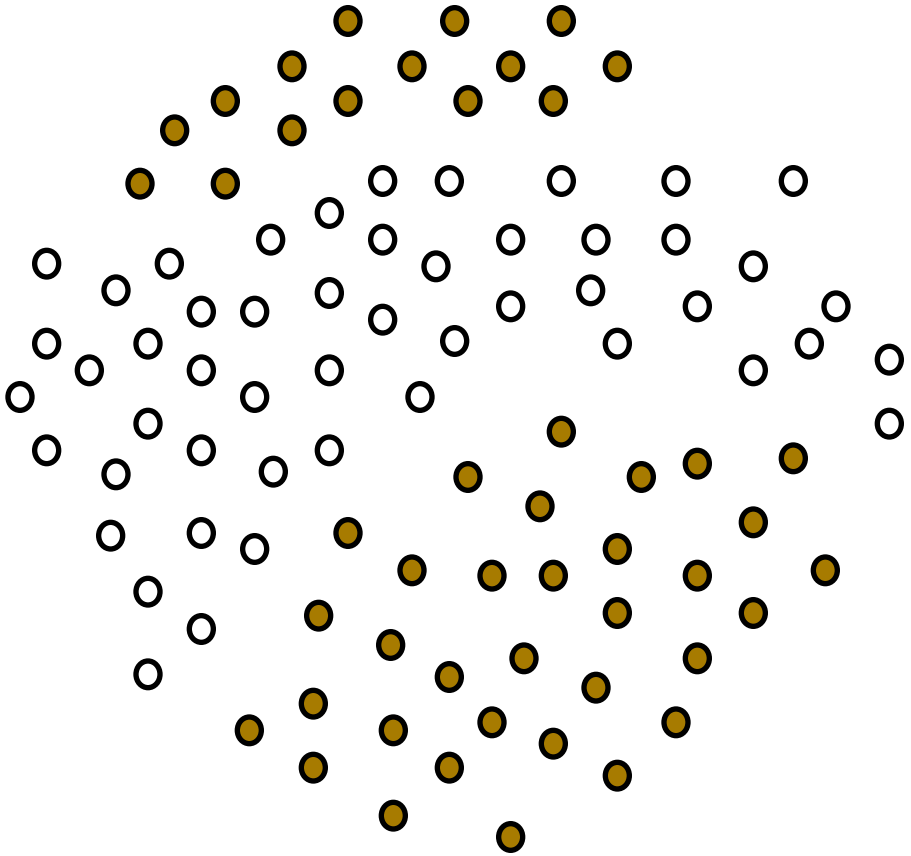
ως προς τα $\lambda_1, \ldots, \lambda_P$, υπό τους περιορισμούς

$$\sum_{i=1}^{P} \lambda_i d_i = 0 \qquad 0 \leq \lambda_i \leq C,\ i = 1, \ldots, P$$

Παρατήρηση

Παρατηρούμε ότι τα ξ_i εμφανίζονται μόνο στο δεύτερο περιορισμό

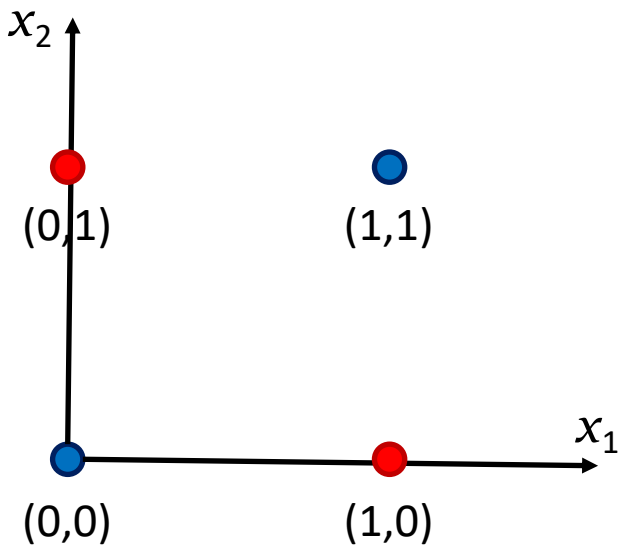
Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις



Παράδειγμα

- Το πρόβλημα XOR ξανά …

x_1	0	0	1	1
x_2	0	1	0	1
t	-1	1	1	-1



- Ξέρουμε ότι το πρόβλημα δεν είναι γραμμικά διαχωρίσιμο

Παράδειγμα

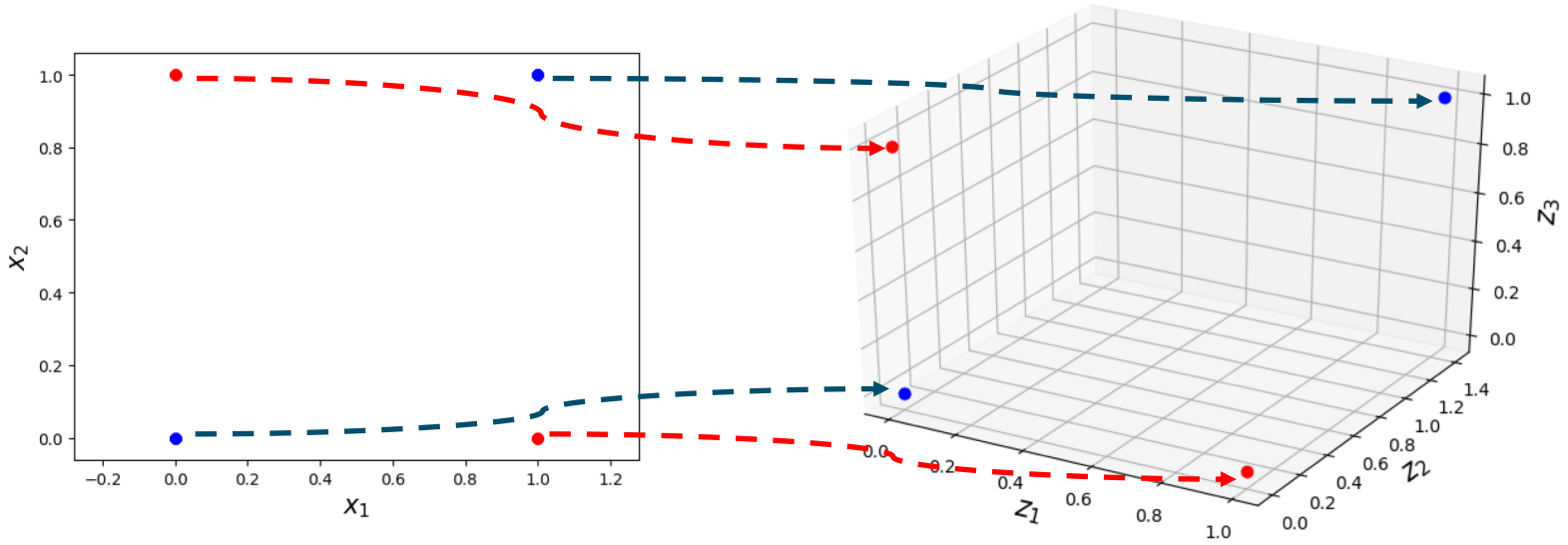
- Ας θεωρήσουμε τον μετασχηματισμό

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \mapsto \mathbf{z} = \Phi(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x_1^2 \\ \sqrt{2}x_1x_2 \\ x_2^2 \end{bmatrix}$$

x_1	0	0	1	1
x_2	0	1	0	1
t	-1	1	1	-1

z_1	0	0	1	1
z_2	0	0	0	1.4142
z_3	0	1	0	1
t	-1	1	1	-1

Μετασχηματισμός



$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{z} = \Phi(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x_1^2 \\ \sqrt{2}x_1x_2 \\ x_2^2 \end{bmatrix}$$

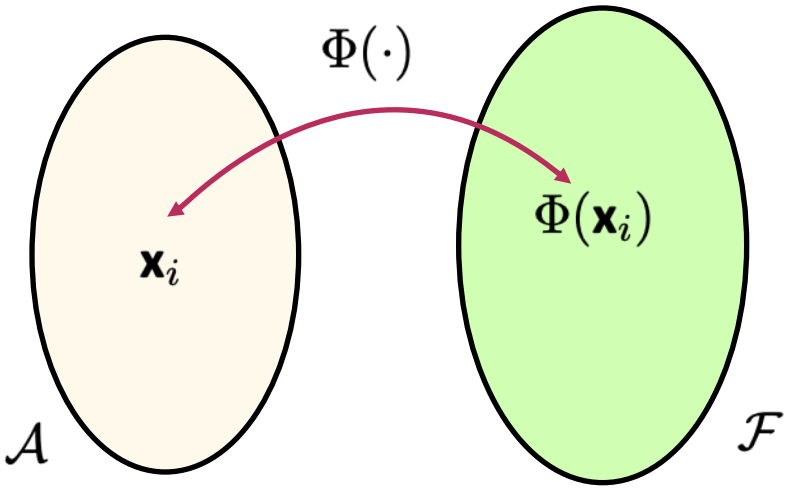
Παράδειγμα (συν.)

- Το μετασχηματισμένο πρόβλημα *τώρα* είναι γραμμικά διαχωρίσιμο!!
- Δοκιμάστε πχ. $\mathbf{w} = [1, -\sqrt{2}, 1], b = -0.5$

w_1	1
w_2	1.4142
w_3	1

z_1	0	0	1	1
z_2	0	0	0	1.4142
z_3	0	1	0	1
$\mathbf{w}^T\mathbf{z}$	0	1	1	0
$\mathbf{w}^T\mathbf{z} + b$	-0.5	0.5	0.5	-0.5

Απεικόνιση σε γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις



$\mathcal{A}$: χώρος εισόδου

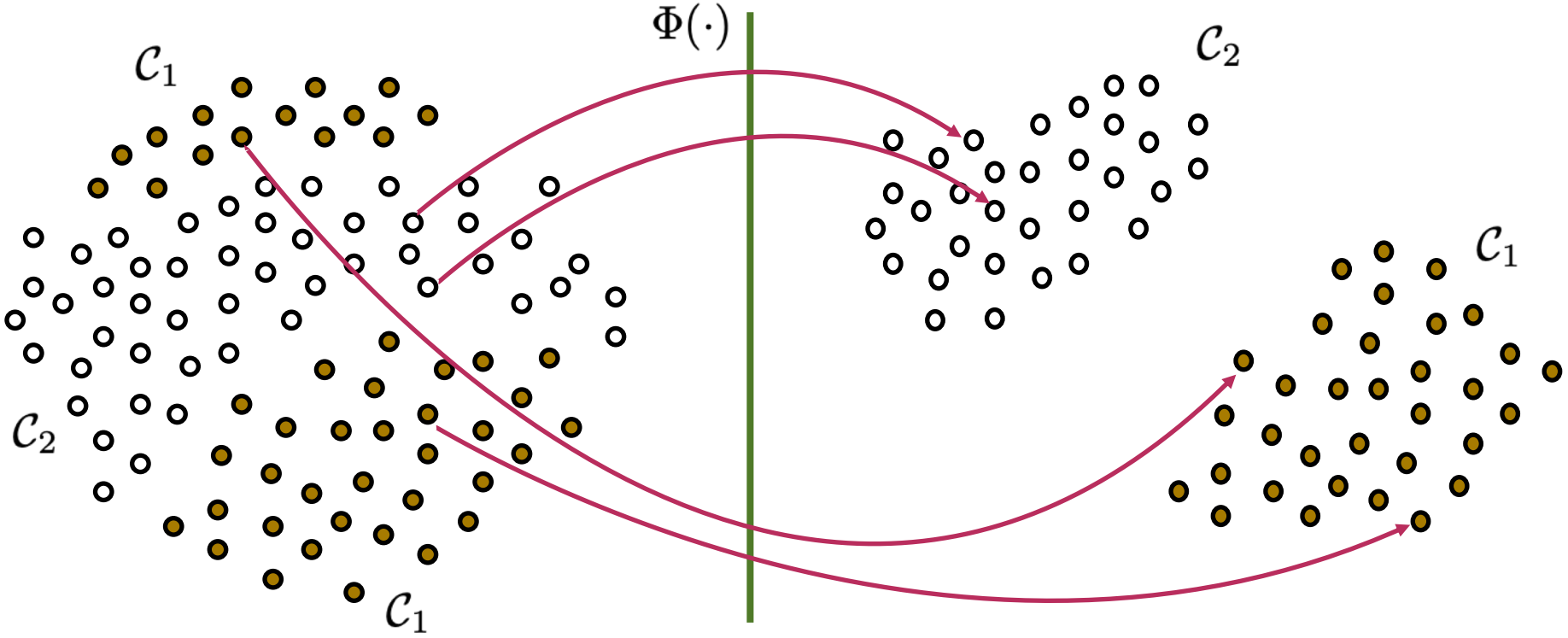
$\mathcal{F}$: χώρος χαρακτηριστικών

$\Phi(\cdot)$: μη-γραμμική συνάρτηση απεικόνισης

Θεώρημα Cover

Κάθε πολυδιάστατος χώρος με μη γραμμικά διαχωρίσιμα πρότυπα, μπορεί να μετασχηματιστεί σε ένα νέο χώρο στον οποίο τα πρότυπα είναι γραμμικά διαχωρίσιμα με *υψηλή πιθανότητα*, αρκεί ο μετασχηματισμός να είναι μη γραμμικός και ο νέος αυτός χώρος να έχει την απαραίτητη διάσταση

Απεικόνιση σε γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις



Λύση δυϊκού προβλήματος

Βέλτιστη διαχωριστική επιφάνεια:

$$g^*(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \Phi(\mathbf{x}) + w_o = \sum_{i=1}^{P} \lambda_i d_i \Phi(\mathbf{x}_i)^\top \Phi(\mathbf{x}) + w_o$$

Κατώφλι:

$$w_o = \frac{1}{|I_{sv}|} \sum_{i \in I_{sv}} \left(\frac{1}{d_i} - \mathbf{w}^\top \Phi(\mathbf{x}_i) \right)$$

Συνάρτηση κόστους του δυϊκού προβλήματος:

$$\mathcal{L}(\lambda_1, \ldots, \lambda_P) = \sum_{i=1}^{P} \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{P} \lambda_i \lambda_j d_i d_j \Phi(\mathbf{x}_i)^\top \Phi(\mathbf{x}_j)$$

Χρήση συναρτήσεων πυρήνα

Παρατήρηση

Παρατηρούμε ότι σε όλες τις εξισώσεις που χρησιμοποιούμε εμφανίζονται γινόμενα της μορφής $\Phi(\mathbf{x})^\top \Phi(\mathbf{y})$.

Η συνάρτηση $\Phi(\cdot)$ δεν εμφανίζεται ποτέ μόνη της.

Ορισμός

Ορίζουμε τη συνάρτηση $k(x, y) = \Phi(\mathbf{x})^\top \Phi(\mathbf{y})$, την οποία θα ονομάζουμε συνάρτηση πυρήνα.

Χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση πυρήνα κάνουμε οικονομία πράξεων ειδικά όταν η διάσταση του Φ(**x**) είναι πολύ μεγαλύτερη από τη διάσταση του x (όπως συνήθως συμβαίνει).

Παράδειγμα

Έστω $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}^\top$

$$\Phi(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x_1^2 & \sqrt{2}x_1x_2 & x_2^2 \end{bmatrix}^\top$$

Για $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \end{bmatrix}^\top$

$$\Phi([1\,2]^\top) = \begin{bmatrix} 1 & 2\sqrt{2} & 4 \end{bmatrix}^\top$$

$$k(x,y) = \Phi(\mathbf{x})^\top \Phi(\mathbf{y}) = (x_1^2y_1^2 + 2x_1y_1y_2 + x_2^2y_2^2)$$

$$= (x_1y_1 + x_2y_2) = (\mathbf{x}^\top \mathbf{y})^2$$

Το Kernel trick

- Επιλέγουμε μια συνάρτηση πυρήνα $K(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ που να παράγεται από κάποια συνάρτηση Φ ως $K(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \Phi(\mathbf{a})^T \Phi(\mathbf{b})$
- Δεν είναι ανάγκη να ξέρουμε την Φ αρκεί να ξέρουμε μαθηματικά ότι υπάρχει
- Δεν είναι όλες οι συναρτήσεις $K(\cdot,\cdot)$ συναρτήσεις πυρήνα. Πρέπει να ικανοποιούν τις προϋποθέσεις του Θεωρήματος Mercer
- Χρησιμοποιούμε την K για να υπολογίσουμε το $\mathbf{Q}$ στο δυϊκό πρόβλημα.
- Λύνουμε το δυϊκό πρόβλημα.
- Επειδή η Φ μετασχηματίζει τα δεδομένα σε χώρο μεγάλων διαστάσεων ελπίζουμε ότι το πρόβλημα εκεί θα λύνεται γραμμικά. Όμως η συνάρτηση διαχωρισμού στον αρχικό χώρο $\mathbf{x}$ δεν θα είναι γραμμική.

Θεώρημα Mercer

Έστω $k(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ ένας συνεχής συμμετρικός πυρήνας, με $\mathbf{a} \leq \mathbf{x}, \mathbf{y} \leq \mathbf{b}$.

Ο πυρήνας $k(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ μπορεί να γραφεί ως:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \Phi_i(\mathbf{x}) \Phi_i(\mathbf{y})$$

με $\alpha_i > 0, \ \forall i$, αν και μόνο αν:

$$\int_b^a \int_b^a k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{y}) dx dy \geq 0$$

για κάθε $\psi(\cdot)$ για την οποία $\int_b^a \psi^2(\mathbf{x}) dx \leq \infty$

Παραδείγματα συναρτήσεων πυρήνα

Γκαουσιανή RBF: $e^{-\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|^2/(2\sigma^2)}$

Πολυωνυμική: $[\mathbf{x}^\top \mathbf{y} + \theta]^p$

Σιγμοειδής: $\tanh\left(\alpha \mathbf{x}^\top \mathbf{y} + \theta\right)$

Αντίστροφη πολυτετραγωνική: $\frac{1}{\sqrt{\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|^2 + c^2}}$

Πρόβλημα SVM

Υπολόγισε το μέγιστο της συνάρτησης:

$$\mathcal{L}_{SVM}(\lambda_1, \ldots, \lambda_P) = \sum_{i=1}^{P} \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{P} \sum_{j=1}^{P} \lambda_i q_{ij} \lambda_j$$

υπό τους περιορισμούς:

$$0 \leq \lambda_i \leq C \qquad \sum_{i=1}^{P} \lambda_i d_i = 0$$

όπου: $q_{ij} = d_i d_j k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$

Παρατήρηση

Το πλήθος των στοιχείων του πίνακα $\mathbf{Q} = [q_{ij}]$ είναι P^2,
συνεπώς είναι αρκετά πολύπλοκη η επίλυση του προβλήματος.

Μέθοδοι υλοποίησης SVM

Μέθοδος τεμαχισμού

Η συνάρτηση κόστους δεν αλλάζει αν αφαιρέσουμε τις γραμμές και τις στήλες του **Q** που αντιστοιχούν σε μηδενικές τιμές του λ_i

Διαλέγουμε σε κάθε βήμα την επίλυση του προβλήματος για το τμήμα του **Q** που αντιστοιχεί στα μη μηδενικά λ_i από το προηγούμενο πρόβλημα και επιπλέον στα K χειρότερα λ_i (που παραβιάζουν περισσότερο τις συνθήκες ΚΚΤ

Μέθοδος Osuna

Αν επιλύσουμε ένα μικρότερο πρόβλημα, επιλέγοντας μερικές μόνο γραμμές του **Q** έτσι ώστε να περιέχεται τουλάχιστον ένα λ_i που παραβιάζει τις συνθήκες ΚΚΤ τότε η συνάρτηση κόστους μειώνεται και όλοι οι περιορισμοί συνεχίζουν να ικανοποιούνται

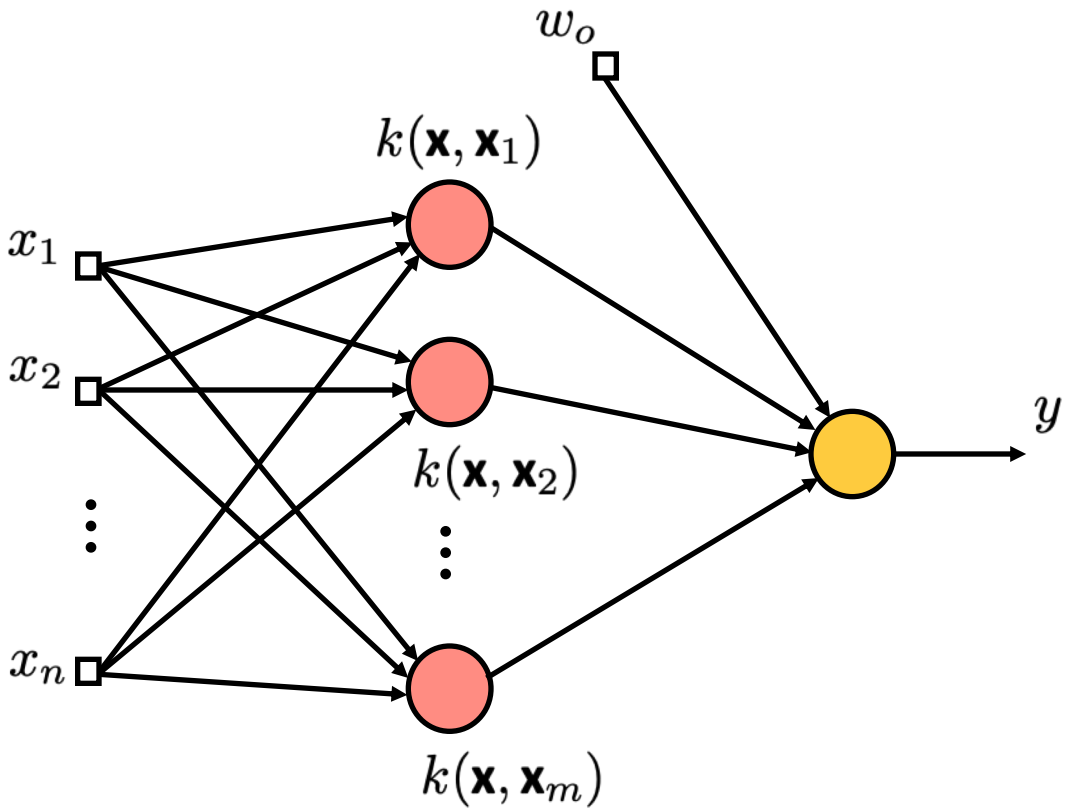
Επιλύουμε το πρόβλημα προσθέτοντας μία μεταβλητή λ_i που παραβιάζει τις συνθήκες και αφαιρώντας μία μεταβλητή για την οποία $\lambda_i = 0$ ή $\lambda_j = C$

Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης

(Support Vector Machines – SVM)

- Μηχανές μάθησης που υλοποιούν την παραπάνω θεωρία με πυρήνα ή χωρίς
- Απαιτούν σαν είσοδο τα διανύσματα $\mathbf{x}_k$ μαζί με τους στόχους t_k άρα ανήκουν στην κατηγορία των μηχανών μάθησης με επίβλεψη
- Βασίζονται στην λύση προβλήματος τετραγωνικού προγραμματισμού. Το πρόβλημα έχει μελετηθεί εκτενώς στα μαθηματικά. Υπάρχουν διάφορες υλοποιήσεις.

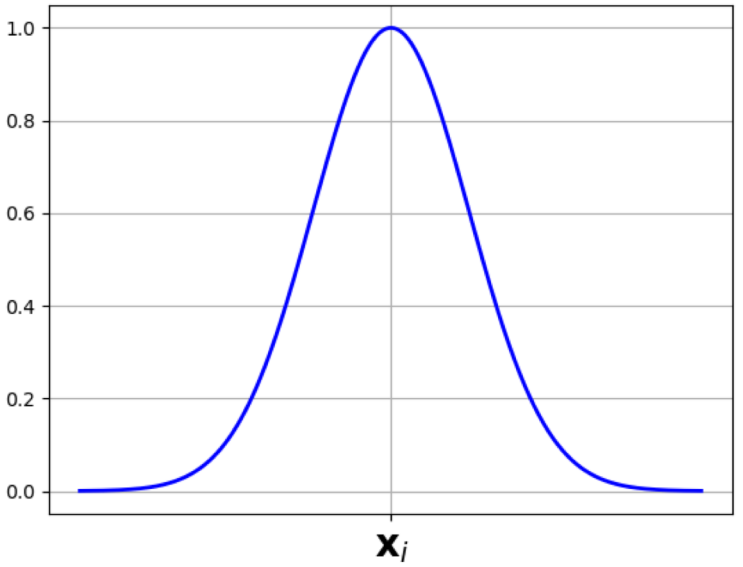
Δίκτυα SVM


w_o
$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1)$
x_1
x_2
$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2)$
y
x_n
$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_m)$

Το μοντέλο RBF

- Ο Γκαουσσιανός πυρήνας

$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \exp\left\{-\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}\|^2}{2\sigma^2}\right\}$$



παράγεται από μια κρυφή συνάρτηση Φ απείρων διαστάσεων.

- Είναι γι’ αυτό το λόγο ίσως ο πιο δημοφιλής πυρήνας.

Ταξινόμηση σε περισσότερες από δύο κλάσεις

- Τα μέχρι τώρα αφορούν σε προβλήματα δυαδικής ταξινόμησης (binary classification)
- Ωστόσο πολλές πρακτικές εφαρμογές περιλαμβάνουν περισσότερες από δύο κλάσεις (multi-class classification)
- Επομένως, είναι εμφανής η ανάγκη γενίκευσης του προβλήματος δυαδικής ταξινόμησης σε ταξινόμηση με περισσότερες κλάσεις
- Διάφορες προσεγγίσεις – δύο απλές είναι οι:
  - One-against-all (ή one-against-the-rest)
  - One-against-one

One-against-all

- Κατασκευάζει δυαδικά μοντέλα SVM με μια κατηγορία ως θετική και τις υπόλοιπες ως αρνητικές
- Π.χ. για 4 κλάσεις, θα δημιουργηθούν τα ακόλουθα 4 SVM:

$y_i = 1$	$y_i = -1$	Συνάρτηση Απόφασης
Κλάση 1	Κλάσεις 2,3,4	$f^1(x) = (w^1)^T x + b^1$
Κλάση 2	Κλάσεις 1,3,4	$f^2(x) = (w^2)^T x + b^2$
Κλάση 3	Κλάσεις 1,2,4	$f^3(x) = (w^3)^T x + b^3$
Κλάση 4	Κλάσεις 1,2,3	$f^4(x) = (w^4)^T x + b^4$

- Για οποιοδήποτε δεδομένο που ανήκει στην κλάση *i*, περιμένουμε ότι:

$$f^i(x) \geq 1 \text{ και } f^j(x) \leq -1, i \neq j$$

- Επομένως, ο κανόνας απόφασης είναι:

$$Αναμενόμενη\ κλάση = arg\,max_{i=1,\dots 4} f^i(x)$$

One-against-one

- Εδώ κατασκευάζονται συνολικά $\binom{k}{2} = \frac{k(k-1)}{2}$ SVMs, για τη δυαδική ταξινόμηση όλων των κλάσεων ανά δύο
- Κάθε δυαδικός ταξινομητής εκπαιδεύεται με δεδομένα 2 κλάσεων
- Κάθε νέα παρατήρηση *x* προς ταξινόμηση δοκιμάζεται σε όλους τους ταξινομητές
- Αν το πρόβλημα των κλάσεων *i* και *j* δείξει ότι η *x* παρατήρηση θα πρέπει να είναι στην *i*, η κλάση *i* παίρνει μία ψήφο
- Στο τέλος, η παρατήρηση *x* αντιστοιχίζεται στην κλάση που έχει λάβει τις περισσότερες ψήφους
- Π.χ.

Κλάσεις	Νικητής
1 2	1
1 3	1
1 4	1
2 3	2
2 4	4
3 4	3

Νικήτρια η κλάση 1

Κλάση	1	2	3	4
Πλήθος ψήφων	3	1	1	1

Support Vector Regression

- Εδώ οι τιμές των στόχων ανήκουν σε συνεχές σύνολο τιμών
- Έστω σύνολο προτύπων $\boldsymbol{x}_i$ και στόχων $t_i, \mathrm{i} = 1, \ldots, \mathrm{N}$.
- Συνάρτηση σφάλματος με ανοχή ε:

$$l_\varepsilon(t, g) = \begin{cases} 0, & \alpha\nu\ |t - g| \leq \varepsilon \\ |t - g| - \varepsilon, & \alpha\nu\ |t - g| > \varepsilon \end{cases}$$

- Η συνάρτηση τιμωρεί τη διαφορά μεταξύ του στόχου και της εκτιμώμενης τιμής g μόνο αν η απόλυτη διαφορά είναι μεγαλύτερη από μια θετική σταθερά ε (ανοχή στο σφάλμα)
- Για γραμμικά επιλύσιμο πρόβλημα, ξεκινάμε θεωρώντας ότι υπάρχει $(\boldsymbol{w}, w_0)$, ώστε $L_\varepsilon(\boldsymbol{w}, w_0) = \sum_{i=1}^{N} l_\varepsilon(t_i, g(x_i; \boldsymbol{w}, w_0)) = 0$. Επιλέγεται η λύση με τη μικρότερη τιμή $\|\boldsymbol{w}\|^2$.
- Πρόβλημα παλινδρόμησης με ανοχή ε:

$$\min \frac{1}{2} \|\boldsymbol{w}\|^2$$

$$t_i - \boldsymbol{w}^T x_i - w_0 \leq \varepsilon \qquad\qquad t_i - \boldsymbol{w}^T x_i - w_0 \geq -\varepsilon$$

Βιβλιογραφία

- [1] Κ. Διαμαντάρας, Δ. Μπότσης, Μηχανική Μάθηση, Εκδόσεις Κλειδάριθμος, 2019.
- [2] S. Theodoridis, Machine Learning: A Bayesian and Optimization Perspective, 2nd Edition, Academic Press, 2020.
- [3] Shai Ben-David and Shai Shalev-Shwartz, Understanding Machine Learning, Cambridge University Press
- Διαφάνειες των συγγραφέων για το σύγγραμμα [1].