



ΚΕΣ 03 – Αναγνώριση Προτύπων και Ανάλυση Εικόνας



Support Vector Machines

Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας
Τηλεπικοινωνιών

Πανεπιστήμιο Πελοποννήσου

- Εισαγωγή
- Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Kernel functions

Περιεχόμενα – Βιβλιογραφία



→ Περιεχόμενα Ενότητας

- ◆ Εισαγωγή
- ◆ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ◆ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ◆ Χρήση συναρτήσεων πυρήνα (kernel functions)

→ Βιβλιογραφία:

- ◆ Duda [2004]: Chapter 5
- ◆ Theodoridis [2002]: Chapter 3

- ★ Εισαγωγή
- Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Kernel functions

Εισαγωγή



- Έστω ένα πρόβλημα ταξινόμησης σε δύο κλάσεις ω_1, ω_2
- Αν τα διανύσματα $\underline{x}_i \in \mathbb{R}^l, i=1,2,\dots,N$ είναι γραμμικά διαχωρίσιμα τότε υπάρχει μια γραμμική συνάρτηση των l -στοιχείων του \underline{x} της μορφής

$$g(\underline{x}) = \underline{w}^T \underline{x} + w_0 = 0 =$$

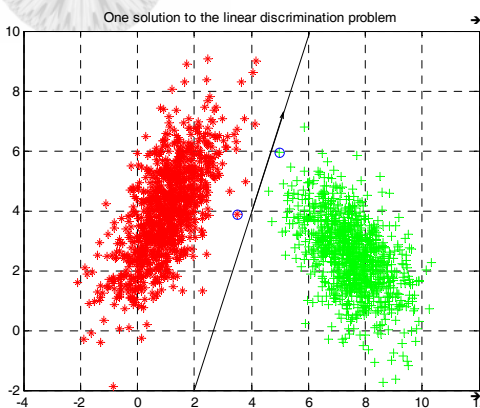
$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_l x_l + w_0$$

η οποία διαχωρίζει τις δύο κλάσεις.

- Το διάνυσμα παραμέτρων $\underline{w} = [w_1, w_2, \dots, w_l]^T$ καθώς και το κατώφλι w_0 προσδιορίζονται από μια διαδικασία μάθησης με βάση τα διανύσματα εκπαίδευσης
- Η συνάρτηση διαχωρισμού μπορεί να υπολογιστεί μέσω του αλγορίθμου Perceptron
- Η ταξινόμηση πραγματοποιείται: $g(\underline{x}) = \underline{w}^T \underline{x} + w_0 > 0 \quad \underline{x} \in \omega_1$
 $g(\underline{x}) = \underline{w}^T \underline{x} + w_0 < 0 \quad \underline{x} \in \omega_2$

- ★ Εισαγωγή
- Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Kernel functions

Πολλαπλές λύσεις



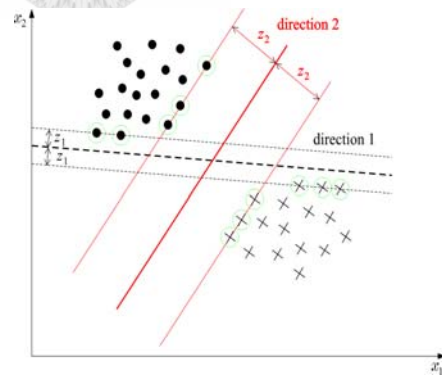
→ Ο αλγόριθμος Perceptron δεν εγγυάται μοναδική λύση επειδή:

- Χρησιμοποιείται τυχαία αρχικοποίηση των βαρών
- Το κριτήριο κόστους ελαχιστοποιεί τα σφάλματα κόστους (και όχι κάποια γεωμετρική απόσταση όπως π.χ. συμβαίνει με τον αλγόριθμο των ελαχίστων τετραγώνων)

Αν θέλαμε να επιλέξουμε την καλύτερη από τις λύσεις τι θα κάναμε;

- ☑ Εισαγωγή
- ★ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☐ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☐ Kernel functions

Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις

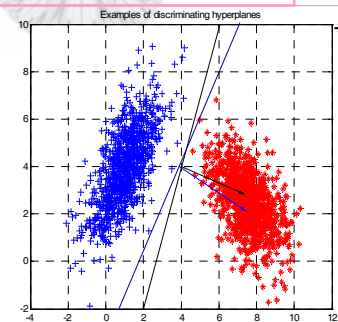


- Η μεθοδολογία SVM (Support Vector Machines) επιλέγει εκείνη την υπερεπιφάνεια διαχωρισμού η οποία:
 - Ισαπέχει από τα πλησιέστερα (σε αυτήν) διανύσματα των δύο κλάσεων. Τα διανύσματα αυτά είναι γνωστά ως **διανύσματα υποστήριξης (support vectors)**
 - Μεγιστοποιεί την απόσταση των διανυσμάτων υποστήριξης από την υπερεπιφάνεια διαχωρισμού. Το διπλάσιο της απόστασης αυτής ονομάζεται **περιθώριο (margin)**

© 2007 Nicolas Tsapatsoulis

- ☑ Εισαγωγή
- ★ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☐ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☐ Kernel functions

Περιθώριο

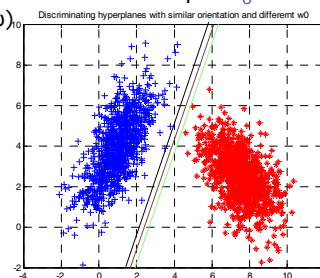


Είδαμε στους γραμμικούς ταξινομητές ότι κάθε υπερεπιφάνεια διαχωρισμού χαρακτηρίζεται από:

- Την κατεύθυνση της όπως προσδιορίζεται από το κάθετο στην επιφάνεια διάνυσμα \underline{w} (βλέπε σχήμα αριστερά)
- Την απόσταση της από την αρχή των αξόνων όπως προσδιορίζεται από το κατώφλι w_0 . (βλέπε σχήμα κάτω)

Βήματα:

- Για κάθε κατεύθυνση τοποθετούμε την επιφάνεια έτσι ώστε η ελάχιστη απόσταση από τις δύο κλάσεις να είναι ίδια
- Ανάμεσα σε όλες τις υπερεπιφάνειες που διαχωρίζουν τα δεδομένα μας επιλέγουμε εκείνη που μεγιστοποιεί το περιθώριο



© 2007 Nicolas Tsapatsoulis

- Εισαγωγή
- Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Kernel functions

Γραμμικός ταξινομητής SVM



- Η απόσταση z_x ενός τυχαίου σημείου \mathbf{x} από την υπερεπιφάνεια διαχωρισμού δίνεται από τη σχέση (αρνητική απόσταση σημαίνει ότι το \mathbf{x} ανήκει στην κλάση ω_2):

$$z_x = \frac{g(\mathbf{x})}{\|\mathbf{w}\|}, \quad \|\mathbf{w}\| = \sqrt{\mathbf{w}^T \mathbf{w}}$$

- Μπορούμε πάντοτε να τροποποιήσουμε τα βάρη \underline{w} , w_0 ώστε η απόσταση των πλησιέστερων στην επιφάνεια σημείων (εκατέρωθεν αυτής) να είναι ίση με ± 1 :

$$|g(\underline{x})| = 1 \quad \{g(\underline{x}) = +1 \text{ για } \underline{x} \in \omega_1 \text{ και } g(\underline{x}) = -1 \text{ για } \underline{x} \in \omega_2\}$$

- Το περιθώριο σε αυτή την περίπτωση δίνεται από τη σχέση:

$$\frac{1}{\|\mathbf{w}\|} + \frac{1}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$$

- Ισχύει επίσης: $\mathbf{w}^T \underline{x} + w_0 \geq 1 \quad \forall \underline{x} \in \omega_1$
 $\mathbf{w}^T \underline{x} + w_0 \leq -1 \quad \forall \underline{x} \in \omega_2$

- Εισαγωγή
- Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Kernel functions

Γραμμικός ταξινομητής SVM (II)



- Για την εύρεση της βέλτιστης υπερεπιφάνειας διαχωρισμού σύμφωνα με την μεθοδολογία SVM ελαχιστοποιούμε:

- **Κριτήριο:**

$$J(\underline{w}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2$$

- **Υποκείμενο στους περιορισμούς:**

$$y_i (\mathbf{w}^T \underline{x}_i + w_0) \geq 1, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

$$y_i = 1, \text{ for } \underline{x}_i \in \omega_1,$$

$$y_i = -1, \text{ for } \underline{x}_i \in \omega_2$$

- Ελαχιστοποίηση της ποσότητας $\|\mathbf{w}\|$ μεγιστοποιεί το περιθώριο $\frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$.

- Οι περιορισμοί διασφαλίζουν ότι δεν υπάρχει σφάλμα ταξινόμησης (υπό την προϋπόθεση ότι οι κλάσεις είναι γραμμικά διαχωρίσιμες)

- Εισαγωγή
- Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Kernel functions

Γραμμικός ταξινομητής SVM (III)



- Το προηγούμενο είναι ένα πρόβλημα **τετραγωνικής βελτιστοποίησης** υποκείμενο σε **γραμμικούς περιορισμούς** υπό τη μορφή ανισοτήτων.
- Για τέτοιου είδους προβλήματα οι συνθήκες KKT (Karush – Kuhh – Tucker) ορίζουν ότι η βέλτιστη λύση ικανοποιεί τις συνθήκες:
 - (1) $\frac{\partial}{\partial \underline{w}} L(\underline{w}, w_0, \underline{\lambda}) = \underline{0}$
 - (2) $\frac{\partial}{\partial w_0} L(\underline{w}, w_0, \underline{\lambda}) = 0$
 - (3) $\lambda_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, N$
 - (4) $\lambda_i (y_i (\underline{w}^T \underline{x}_i + w_0) - 1) = 0, i = 1, 2, \dots, N$
- Η συνάρτηση $L(\cdot, \cdot, \cdot)$ είναι μια συνάρτηση Langrange:

$$L(\underline{w}, w_0, \underline{\lambda}) \equiv \frac{1}{2} \underline{w}^T \underline{w} - \sum_{i=1}^N \lambda_i [y_i (\underline{w}^T \underline{x}_i + w_0)]$$

© 2007 Nicolas Tsapatsoulis

- Εισαγωγή
- Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Kernel functions

Γραμμικός ταξινομητής SVM (IV)



- Η λύση του ανωτέρου προβλήματος ικανοποιεί τις σχέσεις (εφαρμογή των σχέσεων (1), (2) στη συνάρτηση Langrange):

$$\underline{w} = \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i \underline{x}_i \quad \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0$$

και υπόκειται στους περιορισμούς:

$$\lambda_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, N$$

$$\lambda_i (y_i (\underline{w}^T \underline{x}_i + w_0) - 1) = 0, i = 1, 2, \dots, N$$

- Στις παραπάνω σχέσεις προκύπτει μια μοναδική λύση για το διάνυσμα βαρών \underline{w} η οποία όμως μπορεί να αντιστοιχεί σε διάφορες τιμές των πολλαπλασιαστών Langrange (λ)

© 2007 Nicolas Tsapatsoulis

- Εισαγωγή
- Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Kernel functions

Παρατηρήσεις σχετικά με τη βέλτιστη λύση



- Οι πολλαπλασιαστές Langrange (λ_i) μπορεί να είναι είτε θετικοί είτε μηδενικοί. Επομένως:

$$(1) \quad \underline{w} = \sum_{i=1}^{N_s} \lambda_i y_i \underline{x}_i$$

όπου $N_s \leq N$ είναι ο αριθμός των μη μηδενικών πολλαπλασιαστών Langrange.

- Από τη σχέση: $\lambda_i (y_i (\underline{w}^T \underline{x}_i + w_0) - 1) = 0, i = 1, 2, \dots, N$ προκύπτει ότι τα διανύσματα τα οποία συνεισφέρουν στον υπολογισμό του \underline{w} σύμφωνα με τη σχέση (1) ανωτέρω πληρούν τη σχέση:

$$\underline{w}^T \underline{x}_i + w_0 = \pm 1$$

είναι δηλαδή διανύσματα υποστήριξης (support vectors)

- Εισαγωγή
- Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Kernel functions

Παρατηρήσεις σχετικά με τη βέλτιστη λύση (II)



- Εφόσον υπολογιστεί το διάνυσμα \underline{w} το κατώφλι w_0 υπολογίζεται από τις σχέσεις:

$$\lambda_i (y_i (\underline{w}^T \underline{x}_i + w_0) - 1) = 0, i = 1, 2, \dots, N$$

- Οι επίλυση του προηγούμενου προβλήματος τετραγωνικής βελτιστοποίησης πραγματοποιείται με επαναληπτικές μεθόδους βελτιστοποίησης διότι δεν υπάρχει μοναδική λύση για τους πολλαπλασιαστές Langrange
- Μια πιο απλή μορφή του προβλήματος μπορεί να διατυπωθεί με τη βοήθεια της αρχής της δυαδικότητας (duality principle)

- Εισαγωγή
- Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Kernel functions

Διαδικό πρόβλημα εύρεσης της βέλτιστης λύσης



- Με τη μεθοδολογία SVM που περιγράφηκε νωρίτερα ορίζεται ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης με:
 - Κυρτή συνάρτηση κόστους (μοναδικό ελάχιστο)
 - Κυρτή περιοχή πιθανών λύσεων
- Οι δύο προηγούμενες συνθήκες μας εξασφαλίζουν ότι το πρόβλημα μπορεί να λυθεί με δυαδικό τρόπο (μεγιστοποίηση της συνάρτησης Lagrange ως προς λ αντί ελαχιστοποίηση ως προς \underline{w} , w_0):

$$L(\underline{w}, w_0, \underline{\lambda}) = \frac{1}{2} \underline{w}^T \underline{w} - \sum_{i=1}^N \lambda_i [y_i (\underline{w}^T \underline{x}_i + w_0)]$$

- Μεγιστοποίηση της $L(\underline{w}, w_0, \underline{\lambda})$ ως προς $\underline{\lambda}$ $\underline{\lambda}^* = \arg \max_{\underline{\lambda}} (L(\underline{w}, w_0, \underline{\lambda}))$

Υποκείμενη στους περιορισμούς:

$$\begin{aligned} \underline{w} &= \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i \underline{x}_i \\ \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i &= 0 \\ \lambda &\geq 0 \end{aligned}$$

- Εισαγωγή
- Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Kernel functions

Διαδικό πρόβλημα εύρεσης της βέλτιστης λύσης (II)



- Με συνδυασμό των πρώτων δύο σχέσεων:

$$\underline{\lambda}^* = \arg \max_{\underline{\lambda}} (L(\underline{w}, w_0, \underline{\lambda}))$$

$$\underline{w} = \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i \underline{x}_i$$

Καταλήγουμε στο πρόβλημα: $\underline{\lambda}^* = \arg \max_{\underline{\lambda}} \left(\sum_{i=1}^N \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_i \lambda_j y_i y_j \underline{x}_i^T \underline{x}_j \right)$

υποκείμενο στους περιορισμούς: $\sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0$

$$\lambda \geq 0$$

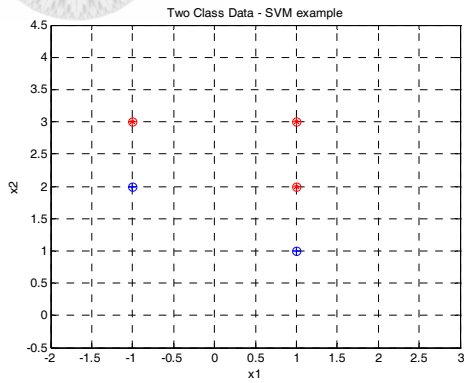
το οποίο είναι εμφανώς απλούστερο στη λύση από το αρχικό

- Παρατηρήστε ότι στη σχέση $\underline{\lambda}^* = \arg \max_{\underline{\lambda}} \left(\sum_{i=1}^N \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_i \lambda_j y_i y_j \underline{x}_i^T \underline{x}_j \right)$

τα διανύσματα υποστήριξης υπεισέρχονται ανά ζεύγη

- ☑ Εισαγωγή
- ★ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☐ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☐ Kernel functions

Παράδειγμα

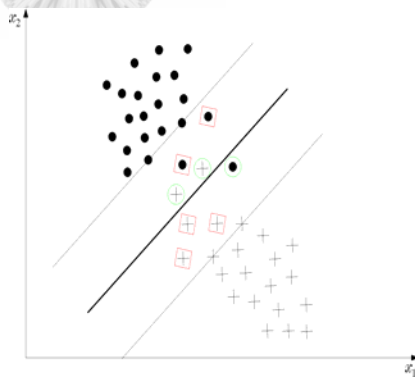


- Να βρεθεί η συνάρτηση διαχωρισμού των κλάσεων του σχήματος ($w_1 \Rightarrow$ κόκκινα πρότυπα) με τη μεθοδολογία SVM.
- Θεωρήστε ότι είναι γνωστό ότι η γραμμή διαχωρισμού περνά από το σημείο [0 2]
- Προχωρήστε στην διατύπωση και επίλυση των συνθηκών KKT
- Τι θα συνέβαινε αν δεν γνωρίζαμε ότι το σημείο ικανοποιεί την εξίσωση της συνάρτησης διαχωρισμού;

© 2007 Nicolas Tsapatsoulis

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☐ Kernel functions

Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις



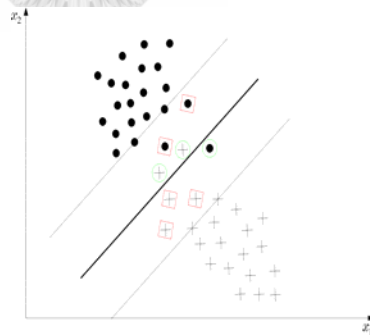
- Μπορεί η μεθοδολογία SVM να εφαρμοστεί σε μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις w_1, w_2 (όπως αυτές του σχήματος);
- Προφανώς σε αυτή την περίπτωση δεν υπάρχει υπερεπιφάνεια για την οποία να ισχύει:

$$\underline{w}^T \underline{x} + w_0 (><) 1, \forall \underline{x}$$

© 2007 Nicolas Tsapatsoulis

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☐ Kernel functions

Κατάταξη διανυσμάτων εκπαίδευσης ως προς το περιθώριο



Τα διανύσματα εκπαίδευσης υπάγονται σε μια από τις τρεις επόμενες κατηγορίες:

→ Διανύσματα **εκτός** της περιοχής που ορίζεται από το περιθώριο τα οποία έχουν ταξινομηθεί **ορθά**. Για τα διανύσματα αυτά ισχύει η σχέση:

$$y_i(\underline{w}^T \underline{x} + w_0) > 1$$

→ Διανύσματα **εντός** της περιοχής που ορίζεται από το περιθώριο τα οποία έχουν ταξινομηθεί **ορθά**. Για τα διανύσματα αυτά ισχύει η σχέση:

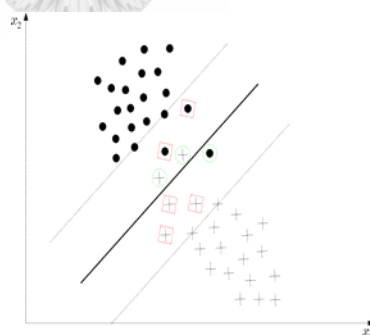
$$0 \leq y_i(\underline{w}^T \underline{x} + w_0) < 1$$

→ Εσφαλμένα ταξινομημένα διανύσματα. Σε αυτή την περίπτωση ισχύει η σχέση:

$$y_i(\underline{w}^T \underline{x} + w_0) < 0$$

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☐ Kernel functions

Κατάταξη διανυσμάτων εκπαίδευσης ως προς το περιθώριο (II)



Οι τρεις προηγούμενες περιπτώσεις μπορούν να περιγραφούν από μια ενιαία σχέση:

$$y_i(\underline{w}^T \underline{x} + w_0) \geq 1 - \xi_i$$

- (1) $\xi_i = 0$
- (2) $0 < \xi_i \leq 1$
- (3) $1 < \xi_i$

→ Οι μεταβλητές ξ_i είναι γνωστές ως «χαλαρές» μεταβλητές (**slack variables**)

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☐ Kernel functions

Εύρεση βέλτιστης λύσης



- Η βελτιστοποίηση τώρα αφορά δύο επίπεδα
 - Μεγιστοποίηση του περιθωρίου
 - Ελαχιστοποίηση του αριθμού των προτύπων για τα οποία ισχύει $\xi_i > 0$ (δηλαδή πρότυπα είτε εσφαλμένα ταξινομημένα είτε εντός της περιοχής του περιθωρίου)

- Σύμφωνα με τα προηγούμενα μια κατάλληλη συνάρτηση κόστους είναι:

$$J(\underline{w}, w_0, \underline{\xi}) = \frac{1}{2} \|\underline{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^N I(\xi_i)$$

όπου C είναι μια σταθερά που καθορίζει τη βαρύτητα της εσφαλμένης ταξινόμησης στη συνολική βελτιστοποίηση και

$$I(\xi_i) = \begin{cases} 1 & \xi_i > 0 \\ 0 & \xi_i = 0 \end{cases}$$

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☐ Kernel functions

Εύρεση βέλτιστης λύσης (II)



- Στη προηγούμενη συνάρτηση κόστους η μεταβλητή $I(\cdot)$ δεν είναι παραγωγίσιμη με αποτέλεσμα να μην είναι εφικτή εύρεση της βέλτιστης λύσης μέσω των συνθηκών ΚΚΤ.
- Για να αντιμετωπιστεί το προηγούμενο προσεγγίζουμε τη προηγούμενη συνάρτηση κόστους με τη συνάρτηση:

$$J(\underline{w}, w_0, \underline{\xi}) = \frac{1}{2} \|\underline{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^N \xi_i$$

η οποία είναι παραγωγίσιμη

- Εφαρμόζοντας όμοια μεθοδολογία ορίζουμε τη συνάρτηση Langrange με δύο κατηγορίες πολλαπλασιαστών $(\underline{\mu}, \underline{\lambda})$:

$$L(\underline{w}, w_0, \underline{\lambda}) \equiv \frac{1}{2} \underline{w}^T \underline{w} + C \sum_{i=1}^N \mu_i \xi_i - \sum_{i=1}^N \xi_i - \sum_{i=1}^N \lambda_i [y_i (\underline{w}^T \underline{x}_i + w_0) - 1 + \xi_i]$$

- Εισαγωγή
- Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Kernel functions

Εύρεση βέλτιστης λύσης (III)



→ Οπότε οι συνθήκες ΚΚΤ υπολογίζονται με παρόμοιο τρόπο όπως προηγουμένως :

$$(1) \underline{w} = \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i x_i$$

$$(2) \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0$$

$$(3) C - \mu_i - \lambda_i = 0, i = 1, 2, \dots, N$$

$$(4) \lambda_i [y_i (\underline{w}^T x_i + w_0) - 1 + \xi_i] = 0, i = 1, 2, \dots, N$$

$$(5) \mu_i \xi_i = 0, i = 1, 2, \dots, N$$

$$(6) \mu_i, \lambda_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, N$$

- Εισαγωγή
- Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- Kernel functions

Δυαδικό πρόβλημα



→ Το δυαδικό πρόβλημα ορίζεται όπως στην περίπτωση των γραμμικά διαχωρίσιμων κλάσεων και καταλήγει στις σχέσεις:

$$\underline{\lambda}^* = \arg \max_{\underline{\lambda}} \left(\sum_{i=1}^N \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_i \lambda_j y_i y_j x_i^T x_j \right)$$

$$0 \leq \lambda_i \leq C, i = 1, 2, \dots, N$$

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0$$

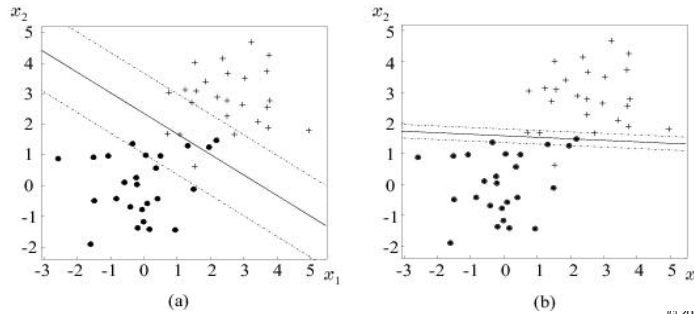
το οποίο διαφέρει από το αντίστοιχο των γραμμικά διαχωρίσιμων κλάσεων μόνο ως προς την παρουσία της σταθεράς C στους περιορισμούς

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☐ Kernel functions

Παράδειγμα



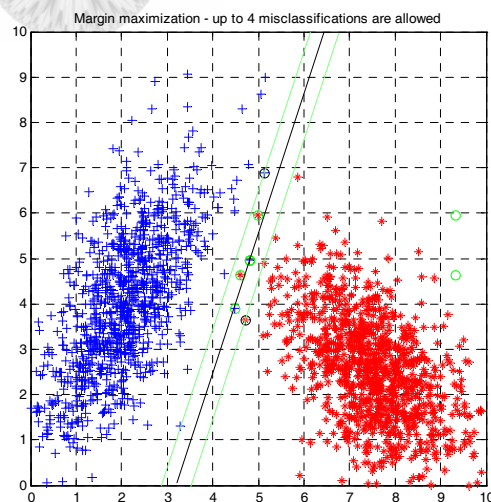
- Στο παρακάτω σχήμα φαίνεται η επίδραση της σταθεράς C στον ορισμό του περιθωρίου ανάμεσα σε δύο μη διαχωρίσιμες κλάσεις (στο σχήμα (a) έχουμε μικρή τιμή για το C ($C = 0.2$) ενώ στη περίπτωση (b) σαφώς μεγαλύτερη τιμή ($C = 1000$))
- Για σκοπούς βελτίωσης της γενικευτικής ικανότητας (ικανότητα σωστής ταξινόμησης άγνωστων διανυσμάτων) η περίπτωση (a) είναι γενικά περισσότερο αξιόπιστη



© 2007 Nicolas Tsapatsoulis

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☐ Kernel functions

Παράδειγμα (II)



→ Στο παράδειγμα του σχήματος:

- Να βρείτε τα διανύσματα υποστήριξης (support vectors)
- Να βρείτε τις εσφαλμένες ταξινομήσεις
- Να βρείτε τα διανύσματα που έχουν ταξινομηθεί σωστά και ανήκουν στην περιοχή του περιθωρίου

© 2007 Nicolas Tsapatsoulis

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☐ Kernel functions

Γενίκευση σε πολλαπλές κλάσεις



- Η μεθοδολογία SVM (είτε για περίπτωση γραμμικά διαχωρίσιμων κλάσεων είτε για μη γραμμικά διαχωρίσιμες) μπορεί να εφαρμοστεί σε περίπτωση που τα πρότυπα μας ανήκουν σε M κλάσεις ($\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_M$).
- Ο απλούστερος τρόπος είναι να θεωρήσουμε M προβλήματα δύο κλάσεων (πρότυπα στη κλάση $\omega_i, i = 1, 2, \dots, M$, σε σχέση με όλα τα υπόλοιπα)
- Εναλλακτική, και πιο πολύπλοκη μέθοδος, υπολογίζει τα περιθώρια των κλάσεων ανά δύο σχηματίζοντας $M*(M-1)/2$ συναρτήσεις διαχωρισμού

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☑ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Kernel functions

SVM με συναρτήσεις πυρήνα



- Ένας τρόπος αντιμετώπισης μη γραμμικά διαχωρίσιμων κλάσεων είναι με μετασχηματισμό των διανυσμάτων εισόδου σε ένα χώρο μεγαλύτερης διάστασης
- Η πιθανότητα διαχωρισμού των ω_1, ω_2 με πρότυπα διαστάσεων $\underline{x} \in R^l$ αυξάνει με την αύξηση της διάστασης των προτύπων από l σε k ($k > l$).
- Έστω ο μετασχηματισμός $\underline{x} \in R^l \rightarrow \underline{z} \in R^k, k > l$
Μπορούμε να εφαρμόσουμε, τότε, τη μεθοδολογία SVM στο χώρο R^k

- Το δυαδικό πρόβλημα βελτιστοποίησης γίνεται:

$$\underline{\lambda}^* = \arg \max_{\underline{\lambda}} \left(\sum_{i=1}^N \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_i \lambda_j y_i y_j \underline{z}_i^T \underline{z}_j \right)$$

$$0 \leq \lambda_i \leq C, i = 1, 2, \dots, N$$

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0$$

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☑ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Kernel functions

SVM με συναρτήσεις πυρήνα (II)



→ Η συνάρτηση διαχωρισμού θα είναι:

$$g(\underline{z}) = \underline{w}^T \underline{z} + w_0 = \sum_{i=1}^{N_s} \lambda_i y_i \underline{z}_i^T \underline{z}, \quad \text{όπου } \underline{x} \rightarrow \underline{z} \in R^k$$

- Το πρόβλημα με την πιο πάνω σχέση είναι ότι περιλαμβάνει N_s εσωτερικά γινόμενα $(\underline{z}_i^T \underline{z})$ σε ένα χώρο μεγάλης διάστασης (R^k) και επομένως είναι υπολογιστικά πολύπλοκη.
- Κάτω από ορισμένες προϋποθέσεις μπορούμε να υπολογίσουμε τα ανωτέρω εσωτερικά ως συναρτήσεις των εσωτερικών γινομένων $(\underline{x}_i^T \underline{x})$ όπως φαίνεται στο επόμενο παράδειγμα:

Έστω $\underline{x} = [x_1, x_2]^T \in R^2$

Μετασχηματίζοντας το $\underline{x} \rightarrow \underline{z} = \begin{bmatrix} x_1^2 \\ \sqrt{2}x_1x_2 \\ x_2^2 \end{bmatrix} \in R^3$

→ Είναι εύκολο να δείξουμε ότι:

$$\underline{y}_i^T \underline{y}_j = (\underline{x}_i^T \underline{x}_j)^2$$

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☑ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Kernel functions

Θεώρημα Mercer



Έστω $\underline{x} \rightarrow \underline{\Phi}(\underline{x}) \in H$

→ Το εσωτερικό γινόμενο στο χώρο H δίνεται από τη σχέση:

$$\sum_r \Phi_r(\underline{x}) \Phi_r(\underline{y}) = K(\underline{x}, \underline{y})$$

όπου για τη συνάρτηση $K(\underline{x}, \underline{y})$ ισχύει: $\int K(\underline{x}, \underline{y}) g(\underline{x}) g(\underline{y}) d\underline{x} d\underline{y} \geq 0$

για κάθε συνάρτηση $g(\underline{x})$ τέτοια ώστε: $\int g^2(\underline{x}) d\underline{x} < +\infty$

Η συμμετρική συνάρτηση $K(\underline{x}, \underline{y})$ είναι μια συνάρτηση πυρήνα (kernel function)

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☑ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Kernel functions

Χρησιμότητα συναρτήσεων πυρήνα



→ Το ενδιαφέρον με τις συναρτήσεις πυρήνα είναι ότι αντιστοιχούν πάντοτε σε εσωτερικό γινόμενο σε ΚΑΠΟΙΟ χώρο μικρότερης διάστασης:

→ Παραδείγματα συναρτήσεων πυρήνα:

→ Πολυωνυμικές: $K(\underline{x}, \underline{z}) = (\underline{x}^T \underline{z} + 1)^q, q > 0$

→ Ακτινικές συναρτήσεις βάσης: $K(\underline{x}, \underline{z}) = \exp\left(-\frac{\|\underline{x} - \underline{z}\|^2}{\sigma^2}\right)$

→ Υπερβολική εφαπτομένη:

$$K(\underline{x}, \underline{z}) = \tanh(\beta \underline{x}^T \underline{z} + \gamma)$$

για κάποιες κατάλληλες τιμές των παραμέτρων β, γ

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☑ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Kernel functions

SVM με συναρτήσεις πυρήνα



→ Η χρήση των συναρτήσεων πυρήνα μας βοηθά να μεταβούμε σε κάποιο χώρο υψηλότερης διάστασης στον οποίο είναι πιθανό το πρόβλημα μας να είναι γραμμικό.

→ Ο χώρος αυτός δεν μας είναι γνωστός (και στην πραγματικότητα δεν θα θέλαμε να είναι γνωστός)

→ Η μεθοδολογία συνοψίζεται στα πιο κάτω βήματα:

→ **Βήμα 1⁰**: Επιλογή κάποιων συναρτήσεων πυρήνα. Οι πιο συχνά χρησιμοποιούμενες είναι οι ακτινικές συναρτήσεις (Radial Basis Functions)

→ **Βήμα 2⁰**: Επίλυση του δυαδικού προβλήματος

$$\underline{\lambda}^* = \arg \max_{\underline{\lambda}} \left(\sum_{i=1}^N \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \lambda_i \lambda_j y_i y_j K(\underline{x}_i^T, \underline{x}_j) \right)$$

$$0 \leq \lambda_i \leq C, i = 1, 2, \dots, N$$

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0$$

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☑ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Kernel functions

SVM με συναρτήσεις πυρήνα (II)



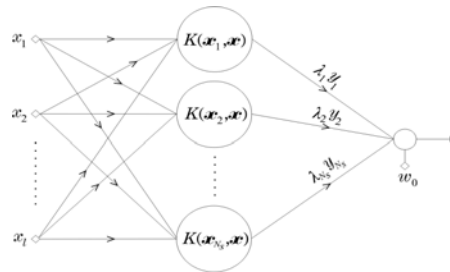
→ Το βήμα 2 στην ουσία οδηγεί σε έμμεσο συνδυασμό της μορφής:

$$\underline{w} = \sum_{i=1}^{N_1} \lambda_i y_i \underline{\varphi}(x_i)$$

→ **Βήμα 3⁰**: Το διάνυσμα \underline{x} ταξινομείται σύμφωνα με τον πιο κάτω κανόνα:

$$\omega_1(\omega_2) \text{ if } g(\underline{x}) = \sum_{i=1}^{N_1} \lambda_i y_i K(\underline{x}_i, \underline{x}) + w_0 > (<) 0$$

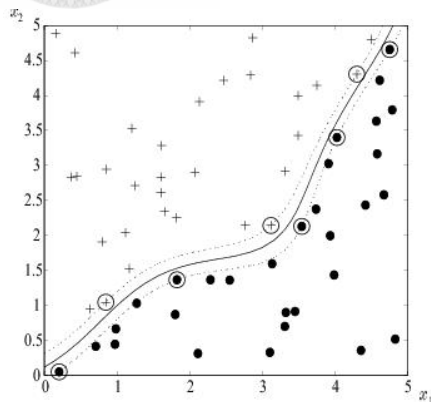
→ Αρχιτεκτονική SVM:



© 2007 Nicolas Tsapatsoulis

- ☑ Εισαγωγή
- ☑ Γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ☑ Μη γραμμικά διαχωρίσιμες κλάσεις
- ★ Kernel functions

Παράδειγμα



→ Το παράδειγμα του σχήματος δείχνει πως δυο γραμμικά μη διαχωρίσιμες κλάσεις διαχωρίζονται με τη χρήση συναρτήσεων πυρήνα:

→ 8 συναρτήσεις πυρήνα (8 support vectors) - 5 αντιστοιχούν στην κλάση **o** και τρεις στην κλάση **+**

© 2007 Nicolas Tsapatsoulis