Συναρτήσεις Διάκρισης και Επιφάνειες Απόφασης

[#20]

Σε ένα M-ταξινό πρόβλημα ταξινόμησης μεταξύ των κλάσεων $\{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_M\}$, όταν οι περιοχές απόφασης μεταξύ των κατηγοριών (ω_i) και (ω_j), R_i και R_j είναι συνεχείς, τότε διαχωρίζονται από μια επιφάνεια απόφασης στον πολυδιάστατο χώρο των χαρακτηριστικών.

Η επιφάνεια απόφασης (decision surface) μεταξύ των κλάσεων (ω_i) και (ω_j) στην περίπτωση που ο χρησιμοποιούμενος ταξινομητής λειτουργεί επάνω στην βάση της ελαχιστοποίησης της πιθανότητας σφάλματος, προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης:

$$\boxed{P(\omega_i \mid \underline{x}) - P(\omega_j \mid \underline{x}) = 0}$$

Είναι προφανές πως από την μία πλευρά της επιφάνειας η διαφορά είναι θετική ενώ από την άλλη πλευρά της επιφάνειας η διαφορά είναι αρνητική.

Σε αρκετές περιπτώσεις είναι θεμιτό να μην εργαστεί κανείς απευθείας με τις εκφράσεις των δεσμευμένων πιθανοτήτων αλλά να τις αντικαταστήσει με ισοδύναμες συναρτησιακές μορφές όπως είναι παρακάτω:

$$\boxed{g_i(\underline{x}) \equiv f(P(\omega_i \mid \underline{x}))}$$

όπου η $f(\cdot)$ είναι μια γνησίως αύξουσα συνάρτηση. Οι συναρτήσεις $g_i(\underline{x})$ αναφέρονται ως συναρτήσεις διάκρισης (discriminant functions) και ο αντίστοιχος κανόνας απόφασης μπορεί να διατυπωθεί ως:

$$\boxed{\text{ανάθεση ενός άγνωστου προτύπου } \underline{x} \text{ στην κλάση } \omega_i \text{ εάν } g_i(\underline{x}) > g_j(\underline{x}),\ \forall i \neq j}$$

Οι επιφάνειες απόφασης που διαχωρίζουν τις συνεχείς περιοχές R_i και R_j θα δίνονται από τις συναρτήσεις:

$$\boxed{g_{ij}(\underline{x}) = g_i(\underline{x}) - g_j(\underline{x}),\quad 1 \le i, j \le M,\ i \neq j}$$

Μπεϋζιανός Ταξινομητής για Κανονικά Κατανεμημένες Κλάσεις [#21]

Στόχος της συγκεκριμένης ενότητας είναι μελέτη του Βέλτιστου Μπεϋζιανού ταξινομητή στην περίπτωση κατά την οποία οι συναρτήσεις πιθανοφάνειας των εμπλεκόμενων κλάσεων σε ένα πρόβλημα ταξινόμησης $p(\underline{x}|\omega_i)$ [likelihood functions of ω_i with respect to $\underline{x}$ or class conditional pdfs of ω_i with respect to $\underline{x}$].
δίνονται από την πολυδιάστατη κανονική κατανομή.

$$\boxed{p(\underline{x}|\omega_i) = N(\underline{\mu}_i, \underline{\underline{\Sigma}}_i)} \quad [1]$$

Λαμβάνοντας υπόψιν την εκθετική μορφή των εμπλεκόμενων συναρτήσεων πυκνότητας πιθανότητας είναι εύλογο να επιλέξει κανείς την λογαριθμική συνάρτηση ως συνάρτηση διάκρισης (discriminant function) [γνησίως αύξουσα] σύμφωνα με την παρακάτω σχέση:

$$\boxed{g_i(\underline{x}) = \ln(p(\underline{x}|\omega_i)P(\omega_i)) = \ln(p(\underline{x}|\omega_i)) + \ln(P(\omega_i))} \quad [2]$$

Η παραπάνω σχέση μπορεί να γραφεί ως:

$$\boxed{g_i(\underline{x}) = -\frac{1}{2}(\underline{x}-\underline{\mu}_i)^T \underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1}(\underline{x}-\underline{\mu}_i) + \ln(P(\omega_i)) + c_i} \quad [3]$$

όπου $\boxed{c_i = -(\ell/2)\ln(2\pi) - (1/2)\ln(|\Sigma_i|)}$ [4]

Αναπτύσσοντας τον πρώτο όρο της εξίσωσης (3) έχουμε ότι:

$$(*)\quad -\frac{1}{2}(\underline{x}-\underline{\mu}_i)^T \underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1}(\underline{x}-\underline{\mu}_i) = -\frac{1}{2}(\underline{x}^T-\underline{\mu}_i^T)\underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1}(\underline{x}-\underline{\mu}_i) =$$

$$= -\frac{1}{2}\left\{(\underline{x}^T \underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1} - \underline{\mu}_i^T \underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1})(\underline{x}-\underline{\mu}_i)\right\} =$$

$$= -\frac{1}{2}\left\{\underline{x}^T \underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1}\underline{x} - \underline{x}^T \underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1}\underline{\mu}_i - \underline{\mu}_i^T \underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1}\underline{x} + \underline{\mu}_i^T \underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1}\underline{\mu}_i\right\} =$$

$$= -\frac{1}{2}\left\{\underline{x}^T \underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1}\underline{x} - 2\underline{x}^T \underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1}\underline{\mu} + \underline{\mu}_i^T \underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1}\underline{\mu}_i\right\}$$

Με βάση τα παραπάνω η γενική μορφή της συνάρτησης διάκρισης για τον Μπεϋζιανό Ταξινομητή την περίπτωση όπου οι συναρτήσεις πιθανοφάνειας των επιμέρους κλάσεων ακολουθούν την κανονική κατανομή, δίνονται από την σχέση:

$$\boxed{g_i(\underline{x}) = -\frac{1}{2}\left\{\underline{x}^T \underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1}\underline{x} - 2\underline{x}^T \underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1}\underline{\mu}_i + \underline{\mu}_i^T \underline{\underline{\Sigma}}_i^{-1}\underline{\mu}_i\right\} + \ln(P(\omega_i)) + c_i \quad [5]}$$

[Quadratic Form:] Τετραγωνική Μορφή:

Μια εξίσωση της μορφής

$$\boxed{q(x_1,\dots,x_n) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\, x_i x_j \quad [6]}$$

αποτελεί μια n-αδική τετραγωνική μορφή η οποία μπορεί να γραφτεί πινακοειδώς ως:

$$\boxed{q(\underline{x}) = \underbrace{\underline{x}^T}_{[1\times n]}\,\underbrace{\underline{\underline{A}}}_{[n\times n]}\,\underbrace{\underline{\underline{x}}}_{[n\times 1]} \in \mathbb{R} \quad [7]}$$

Ωστόσο, η γενικότερη συναρτησιακή μορφή μιας τετραγωνικής μορφής πλαισιώνεται από έναν συμμετρικό διγραμμικό όρο: [bilinear term]

$$\boxed{bq(\underline{x},\underline{y}) = \underline{x}^T \underline{\underline{A}}\, \underline{y} = \underline{y}^T \underline{\underline{A}}\, \underline{x} = \frac{1}{2}\left[q(\underline{x}+\underline{y}) - q(\underline{x}) - q(\underline{y})\right]} \quad [8]$$

Εναλλακτικά, η σχέση (8) γράφεται: $\boxed{bq(\underline{x},\underline{y}) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_i y_j} \quad [9]$

(★) Επομένως, η γενικότερη διατύπωση μιας τετραγωνικής μορφής μπορεί να γίνει ως εξής:

$$\boxed{Q(\underline{x},\underline{y}) = q(\underline{x}) + bq(\underline{x},\underline{y}) = \underline{x}^T \underline{\underline{A}}\, \underline{x} + \underline{x}^T \underline{\underline{A}}\, \underline{y}} \quad [10]$$

(★) Προφανώς, ισχύει ότι: $\boxed{bq(x,x) = q(x)} \quad [11]$

(★) Θεωρώντας την ειδική περίπτωση ενός δυαδικού προβλήματος ταξινόμησης μεταξύ των κλάσεων (ω_1) και (ω_2) όπου οι συναρτήσεις πιθανοφάνειας των δύο κλάσεων δίνονται από τις σχέσεις:

$$\begin{cases} p(\underline{x}|\omega_1) = N_n(\underline{\mu}_1, \underline{\underline{\Sigma}}) & \text{και} \\ p(x|\omega_2) = N_n(\underline{\mu}_2, \underline{\underline{\Sigma}}) \end{cases}$$

(★) n-διάστατος χώρος χαρακτηριστικών!!!

με $P(\omega_1) = P(\omega_2) = P$. Να ευρεθεί η επιφάνεια απόφασης (decision surface) μεταξύ των κλάσεων (ω_1) και (ω_2) με βάση του Μπεϋζιανό ταξινομητή. Με $\underline{x} = [x_1\ x_2 \dots x_n]^T$ και $\underline{\mu}_i^T = [\mu_i^{(1)} \mu_i^{(2)} \dots \mu_i^{(n)}]^T$.

Λαμβάνοντας υπόψιν το γεγονός πως οι πίνακες συνδιακύμανσης των δύο συναρτήσεων πυκνότητας πιθανότητας είναι ίδιοι καθώς και το γεγονός πως οι εκ των προτέρων πιθανότητες εμφάνισης των δύο κλάσεων είναι ίσες έχουμε ότι:

$$\boxed{g_i(\underline{x}) = -\frac{1}{2}\left\{\underline{x}^T \underline{\underline{\Sigma}}^{-1}\underline{x} - 2\underline{x}^T \underline{\underline{\Sigma}}^{-1}\underline{\mu}_i + \mu_i^T \underline{\underline{\Sigma}}^{-1}\mu_i\right\} + \ln(P(\omega_i)) + c_i \quad \text{για } i \in \{1,2\}.} \quad [12]$$

όπου $\boxed{c_i = -\frac{n}{2}\ln(2\pi) - \frac{1}{2}\ln(|\Sigma|) = c \ , \ \forall i \in \{1,2\}} \quad [13]$

και $\boxed{\ln(P(\omega_i)) = \ln(P) \ , \ \forall i \in \{1,2\}.} \quad [14]$

Σύμφωνα με τα παραπάνω, η επιφάνεια απόφασης μεταξύ των κλάσεων (ω_1) και (ω_2) θα δίνεται από την σχέση: $\boxed{g(\underline{x}) = 0}$ με

$$g(\underline{x}) = g_1(\underline{x}) - g_2(\underline{x}) \Leftrightarrow$$

$$g(\underline{x}) = -\frac{1}{2}\left\{x^T\Sigma^{-1}x - 2x^T\Sigma^{-1}\mu_1 + \mu_1^T\Sigma^{-1}\mu_1\right\} + \frac{1}{2}\left\{x^T\Sigma^{-1}x - 2x^T\Sigma^{-1}\mu_2 + \mu_2^T\Sigma^{-1}\mu_2\right\}$$

$$\Leftrightarrow$$

$$g(\underline{x}) = x^T\Sigma^{-1}\mu_1 - \frac{1}{2}\mu_1^T\Sigma^{-1}\mu_1 - x^T\Sigma^{-1}\mu_2 + \frac{1}{2}\mu_2^T\Sigma^{-1}\mu_2 \Leftrightarrow$$

$$g(\underline{x}) = -\left\{x^T\Sigma^{-1}\mu_2 - x^T\Sigma^{-1}\mu_1\right\} + \frac{1}{2}\mu_2^T\Sigma^{-1}\mu_2 - \frac{1}{2}\mu_1^T\Sigma^{-1}\mu_1 \Leftrightarrow$$

$$\boxed{g(\underline{x}) = -\left\{x^T\Sigma^{-1}(\mu_2 - \mu_1)\right\} + \frac{1}{2}\left\{\mu_2^T\Sigma^{-1}\mu_2 - \mu_1^T\Sigma^{-1}\mu_1\right\}} \quad [15]$$

★ Γενικά ισχύει ότι: $(a-\beta)^T M(a+\beta) = (a^T - \beta^T)M(a+\beta) =$

$$= (a^TM - \beta^TM)(a+\beta) =$$
$$= a^TMa + a^TM\beta - \beta^TMa - \beta^TM\beta$$
$$= a^TMa - \beta^TM\beta \quad [16]$$

★ Η (16) ισχύει προφανώς και για $\underline{M} = \underline{I}$.

Σύμφωνα με τα παραπάνω, η σχέση (15) γράφεται ως εξής:

$$g(\underline{x}) = -x^T \Sigma^{-1}(\underbrace{\mu_2 - \mu_1}_{a}) + \frac{1}{2}\left\{(\underbrace{\mu_2 - \mu_1}_{a})^T \Sigma^{-1}(\underbrace{\mu_2 + \mu_1}_{\beta})\right\} \quad [17]$$

Κάνοντας την ανάθεση:

(i): $\underline{a} = \underline{\mu}_2 - \underline{\mu}_1$

(ii): $\underline{\beta} = \underline{\mu}_2 + \underline{\mu}_1$

(*) Η ορθότερη παραγωγή έχει ως εξής:

$g(\underline{x}) = x^T \Sigma^{-1}(\mu_1 - \mu_2) - \frac{1}{2}(\mu_1 - \mu_2)^T \Sigma^{-1}(\mu_1 + \mu_2) \Leftrightarrow$

$g(\underline{x}) = (\mu_1 - \mu_2)^T \Sigma^{-1} x - \frac{1}{2}(\mu_1 - \mu_2)^T \Sigma^{-1}(\mu_1 + \mu_2) \Leftrightarrow$

$g(\underline{x}) = (\mu_1 - \mu_2)^T \Sigma^{-1}(x - \frac{1}{2}(\mu_1 + \mu_2)) \Leftrightarrow g(\underline{x}) = w^T(x - x_0)$

με $w = \mu_1 - \mu_2$ και $x_0 = \frac{1}{2}(\mu_1 + \mu_2)$.

έχουμε ότι η επιφάνεια απόφασης μεταξύ των κλάσεων (ω_1) και (ω_2) θα δίνεται από την σχέση:

$$g(\underline{x}) = 0 \Leftrightarrow \boxed{g(\underline{x}) = -\underline{x}^T \underline{\underline{\Sigma}}^{-1} \underline{a} + \frac{1}{2}\underline{a}^T \underline{\underline{\Sigma}}^{-1} \underline{\beta} = \emptyset} \quad [18]$$

Αν $M = \Sigma^{-1}$, τότε η εξίσωση (18) μπορεί να γραφεί στην μορφή:

$$g(\underline{x}) = -\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} m_{ij} x_i a_j + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} m_{ij} a_i \beta_j = 0 \quad [19] \Leftrightarrow$$

$$g(\underline{x}) = \sum_{i=1}^{n}\left(-\sum_{j=1}^{n} m_{ij} a_j\right) x_j + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} m_{ij} a_i \beta_j = \emptyset \quad [20]$$

Η εξίσωση (20) αντιστοιχεί σε μια σχέση της μορφής:

$$\boxed{g(\underline{x}) = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i + w_0 = w^T \cdot x + w_0 = 0 \quad [21]}$$

με $w^T = [w_1 \; w_2 \; \dots \; w_n]$ και

$$\begin{cases} \text{(i)}: \; w_i = -\sum_{j=1}^{n} m_{ij} a_j & [22] \\ \text{(ii)}: \; w_0 = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} m_{ij} a_i \beta_j & [23] \end{cases}$$

Hyperplane

Equation in n-dimensions.