

Γραμμικές Συναρτήσεις Διαχωρισμού και Υπερεπιπέδα Απόφασης

- ΔΥΑΔΙΚΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΑΞΙΝΟΜΗΣΗΣ. ΥΠΟΘΕΣΗ: (\*\*\*)
- ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ ΔΙΑΚΡΙΣΗΣ ΜΕΤΑΞΥ ΚΛΑΣΕΩΝ ΓΡΑΜΜΙΚΕΣ. και
- ΥΠΕΡΕΠΙΘΑΛΕΙΕΣ ΑΠΟΦΑΣΗΣ ΣΤΟΝ  $\mathbb{R}^p$ -ΔΙΑΣΤΑΣΟ (DECISION HYPER-PLANE) (και)  
 ΧΩΡΟ ΤΩΝ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΩΝ ΕΚΦΡΑΖΟΝΤΑΙ ΩΣ ΥΠΕΡΕΠΙΠΕΔΑ.

$$g(\underline{x}) = \underline{w}^T \underline{x} + w_0 = 0 \quad [1] \quad \text{όπου } \underline{w}, \underline{x} \in \mathbb{R}^p \text{ ή } w_0 \in \mathbb{R}$$

• Το διάνυσμα των βαρών  $\underline{w}$  (weight vector) και το κατώφλι ( $w_0$ ) (threshold / bias term) αποτελούν τις βασικές παραμέτρους του υπερ-επιπέδου απόφασης.

• Αν δύο διανύσματα  $\underline{x}_1, \underline{x}_2 \in \mathbb{R}^p$  βρίσκονται ενάνω στο υπερ-επιπέδο απόφασης θα ισχύει ότι:

$$0 = \underline{w}^T \underline{x}_1 + w_0 = \underline{w}^T \underline{x}_2 + w_0 \implies \underline{w}^T (\underline{x}_1 - \underline{x}_2) = 0 \quad [2]$$

Συμπεράσματα:

(A)  $\implies$  Το διάνυσμα της διαφοράς των διανυσμάτων  $(\underline{x}_1 - \underline{x}_2)$  βρίσκεται ενάνω στο υπερ-επιπέδο απόφασης καθώς επαληθεύει την εξίσωση [1].

(B)  $\implies$  Η εξίσωση [2] υποδεικνύει πως το διάνυσμα  $\underline{w}$  είναι ορθώνιο στο υπερ-επιπέδο απόφασης.

$n=2$ )

⊙ Εστω ότι:  $w_1, w_2 > 0$  ή  $w_0 < 0$ .

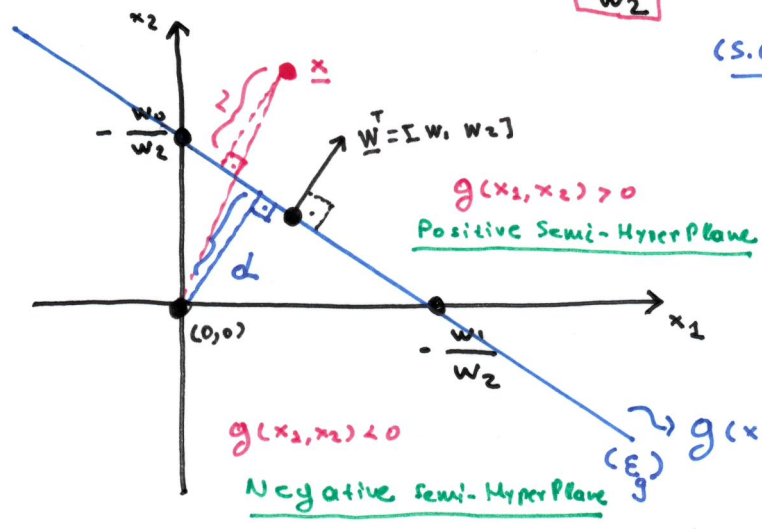
⊙ Έχουμε ότι:

(α):  $g(x_1, x_2) = w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_0 = 0$

(β): Για  $x_1 = 0 \Rightarrow \hat{x}_2 = -\frac{w_0}{w_2}$

(γ): Για  $x_2 = 0 \Rightarrow \hat{x}_1 = -\frac{w_0}{w_1}$

⊙



(S.O.S): Στην περίπτωση κατά την οποία  $w_0 = 0$ , τότε το υπερπίεδο ανόμοιο διαίρεται από την αρχή των αξόνων.

⊙ Ο συντελεστής διεύθυνσης της ευθείας  $g(x_1, x_2) = 0$  (στην ειδική περίπτωση όπου  $n=2$ ) μπορεί να υπολογισθεί ως εξής:

$x_2 = -\frac{w_1}{w_2} \cdot x_1 - \frac{w_0}{w_2}$  [3]

Από αυτή σχέση [3] έχουμε ότι:

$\lambda_g = -\frac{w_1}{w_2}$  [4]

⊙ Ο συντελεστής διεύθυνσης του διανύσματος  $\underline{w} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix}$  θα δίνεται

προφανώς από αυτή σχέση:  $\lambda_w = \frac{w_2}{w_1}$  [5]

⊙ Με βοήθεια παραπάνω, θα έχουμε ότι:

$\lambda_w \cdot \lambda_g = -1$  [6]

που σημαίνει πως το διάνυσμα  $\underline{w}$  είναι κάθετο στην ευθεία  $g$ :

$\underline{w} \perp \epsilon_g$  [7]

\* Θεωρούμε το υπερ-επίπεδο  $g(\underline{x}) = \underline{w}^T \underline{x} + w_0 = 0$ .

\* Θέλουμε να υπολογίσουμε την απόσταση δοσμένου σημείου  $\underline{x}_0$  από το υπερεπίπεδο.

\* Να διατυπωθεί το συζευρισμένο πρόβλημα ως πρόβλημα βελτιστοποίησης.

\* ΔΙΑΤΥΠΩΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ: Η απόσταση  $d(\underline{x}_0, g(\underline{x}))$

του δοσμένου σημείου  $\underline{x}_0$  από το υπερεπίπεδο που δίνεται από την σχέση  $g(\underline{x}) = 0$  αντιστοιχεί στην ελάχιστη απόσταση που μπορεί να έχει ένα σημείο του υπερεπίπεδου  $\underline{x}$  από το σημείο  $\underline{x}_0$ .

OPTIMIZATION PROBLEM:

\* 
$$\min_{\underline{x} \in \mathbb{R}^p} \|\underline{x} - \underline{x}_0\|^2 \quad [8]$$
 s.t.  $g(\underline{x}) = 0$

\* Let  $f(\underline{x}, \underline{x}_0) = \|\underline{x} - \underline{x}_0\|^2$  be the objective/cost function of the optimization problem.

\* The required distance value is given as:

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{x}^* = \arg \min_{\substack{\underline{x} \in \mathbb{R}^p \\ \text{s.t. } g(\underline{x}) = 0}} \|\underline{x} - \underline{x}_0\|^2 \\ \text{and } d(\underline{x}_0, g(\underline{x})) = \|\underline{x}^* - \underline{x}_0\| \end{array} \right\}$$

\* Lagrangian Function

$$L(\underline{x}; \lambda) = f(\underline{x}, \underline{x}_0) + \lambda \cdot g(\underline{x}) \quad [10]$$

\* Karush-Kuhn-Tucker (KKT) Conditions:

(α): Stationarity Conditions

$$\nabla_{\underline{x}} L(\underline{x}; \lambda) = 0 \in \mathbb{R}^{2p} \quad [11]$$

(β): Primal Feasibility Conditions

$$g(\underline{x}) = 0 \in \mathbb{R} \quad [12]$$

(γ): Dual Feasibility Conditions

$$\lambda \geq 0$$

⊛ Solve the system of Eqs. (11), (12):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial \underline{x}} \{ \|\underline{x} - \underline{x}_0\|^2 + \lambda (\underline{W}^T \underline{x} + w_0) \} = \underline{0} \quad [13] \\ \underline{W}^T \underline{x} + w_0 = 0 \quad [14] \end{array} \right. \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial \underline{x}} \{ \underline{x}^T \underline{x} - 2 \underline{x}^T \underline{x}_0 + \underline{x}_0^T \underline{x}_0 + \lambda \underline{W}^T \underline{x} + \lambda w_0 \} = \underline{0} \quad [15] \\ \underline{W}^T \underline{x} + w_0 = 0 \quad [16] \end{array} \right. \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} 2 \underline{x} - 2 \underline{x}_0 + \lambda \underline{W} = \underline{0} \quad [17] \\ \underline{W}^T \underline{x} + w_0 = 0 \quad [18] \end{array} \right.$$

⊛ Eq. (17) yields:  $2(\underline{x} - \underline{x}_0) = -\lambda \underline{W} \Rightarrow \underline{x} - \underline{x}_0 = -\frac{\lambda}{2} \underline{W} \Rightarrow$

$$\boxed{\underline{x}^* = \underline{x}_0 - \frac{\lambda}{2} \underline{W} \quad [19]}$$

⊛ The next step is to derive the optimal value for  $\lambda$ ,  $\lambda^*$ :

Eq. (18) yields:  $\underline{W}^T \underline{x}^* + w_0 = 0 \Rightarrow$

$$\underline{W}^T \left( \underline{x}_0 - \frac{\lambda}{2} \underline{W} \right) + w_0 = 0 \Rightarrow$$

$$\underline{W}^T \underline{x}_0 - \frac{\lambda}{2} \underline{W}^T \underline{W} + w_0 = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{\lambda}{2} \underline{W}^T \underline{W} = \underline{W}^T \underline{x}_0 + w_0 \Rightarrow$$

$$\frac{\lambda}{2} \|\underline{W}\|^2 = \underline{W}^T \underline{x}_0 + w_0 \Rightarrow$$

$$\boxed{J^* = \frac{2}{\|\underline{W}\|^2} \cdot (\underline{W}^T \underline{x}_0 + w_0) \quad (20)}$$

\* Remember, however, that our ultimate goal is to compute the quantity:

$$d(\underline{x}_0; g(\underline{x})) = d_{\min} = \|\underline{x}^* - \underline{x}_0\| = \sqrt{\|\underline{x}^* - \underline{x}_0\|^2} \quad (21)$$

\* Taking into consideration Eq. (19), yields:

$$d_{\min} = \sqrt{\|-\lambda^*/2 \cdot \underline{w}\|^2} = \frac{1}{2} \cdot |\lambda^*| \cdot \|\underline{w}\| \quad (22)$$

\* Substituting  $\lambda^*$  from Eq. (20) into (22) yields:

$$d_{\min} = \frac{1}{2} \cdot \left| \frac{2'}{\|\underline{w}\|^2} \cdot (\underline{w}^T \cdot \underline{x}_0 + w_0) \right| \cdot \|\underline{w}\| \Rightarrow$$

$$d_{\min} = \frac{|\underline{w}^T \underline{x}_0 + w_0|}{\|\underline{w}\|} \quad [23]$$

or equivalently:

$$d_{\min} \equiv d = \frac{|g(\underline{x}_0)|}{\|\underline{w}\|} \quad [24]$$

ΣΤΟΧΟΣ: Υπολογισμός των άγνωστων παραμέτρων του υπερεπιπέδου απόφασης  $\{w_i, i \in \{0, 1, 2, \dots, U\}\}$  μεταξύ των κλάσεων  $\omega_1$  και  $\omega_2$  που δίνεται από την σχέση  $g(\underline{x}) = \underline{w}^T \underline{x} + w_0 = 0$ , υποθέτοντας πως οι δύο κλάσεις είναι γραμμικά διαχωρίσιμες.

Η γραμμική διαχωρισιμότητα των δύο κλάσεων προϋποθέτει πως είναι δυνατός ο προσδιορισμός των παραμέτρων  $(\underline{w}, w_0)$  έτσι ώστε:

$$\begin{cases} \forall \underline{x} \in \omega_1, & \underline{w}^T \underline{x} + w_0 > 0 \\ \forall \underline{x} \in \omega_2, & \underline{w}^T \underline{x} + w_0 < 0 \end{cases} \quad (2)$$

⊛ Το υπερεπιπέδο απόφασης που ορίζεται μέσω της σχέσης (1) μπορεί να διατυπωθεί στην πιο συνοπτική μορφή ως εξής:

$$g(\underline{x}') = \underline{w}'^T \underline{x}' = 0 \quad (3)$$

ορίζοντας τα εκτεταμένα διανύσματα βαρών  $(\underline{w}')$  και χαρακτηριστικών  $(\underline{x}')$  ως εξής:

$$\begin{aligned} \underline{x}' &= [\underline{x}^T, 1]^T \quad (4) \\ \underline{w}' &= [\underline{w}^T, w_0]^T \quad (5) \end{aligned}$$

⊛ Από το σημείο αυτό και μετά θεωρούμε πως  $\underline{w} \equiv \underline{w}'$  και  $\underline{x} \equiv \underline{x}'$ .

⊛ Το πρόβλημα υπολογισμού των παραμέτρων ( $\underline{w}$ ) του διαζυμένου υπερπληπέδου απόφασης μπορεί να διατυπωθεί ως πρόβλημα βελτιστοποίησης. Για του σκοπό αυτό είναι απαραίτητο να υποθεώσουμε:

(A): Ένα κατάλληλο συναρμισιοειδές κόστος

(B): Αλγόριθμο βελτιστοποίησης

COST FUNCTIONAL:

$$J(\underline{w}) = \sum_{\underline{x} \in Y} \delta_{\underline{x}} \circ g(\underline{x}) \quad (6)$$

Ισοδύναμα μπορούμε να γράψουμε ότι:

$$J(\underline{w}) = \sum_{\underline{x} \in Y} \delta_{\underline{x}} \circ (\underline{w}^T \cdot \underline{x}) \quad (7)$$

Το σύνολο  $Y$  περιλαμβάνει τα διανύσματα των χαρακτηριστικών εκπαίδευσης που έχουν ταξινομηθεί εσφαλμένα από το υπερπληπέδο απόφασης που καθορίζεται από το διάνυσμα βαρών  $\underline{w}$ .

Η μεταβλητή  $\delta_{\underline{x}}$  ορίζεται ως εξής:

$$\delta_{\underline{x}} = \begin{cases} -1, & \underline{x} \in \omega_1; \\ +1, & \underline{x} \in \omega_2. \end{cases} \quad (8)$$

Είναι προφανές πως η ποσότητα  $J(\underline{w})$  θα πρέπει να παραμείνει θετική.

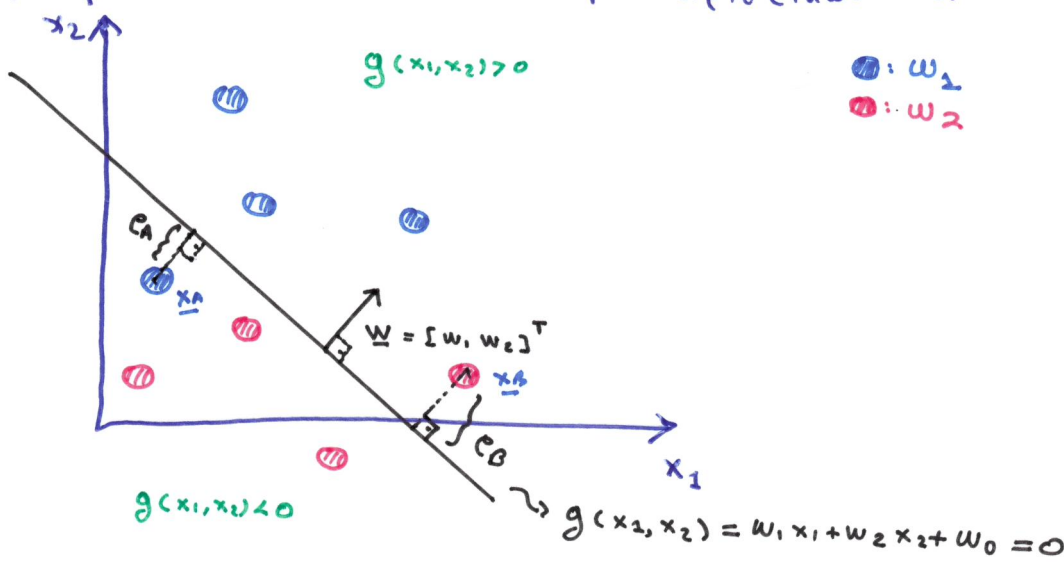
Πράγματι έχουμε ότι:

$$\left\{ \forall \underline{x} \in Y, \text{sign}[g(\underline{x})] = \begin{cases} -1, & \underline{x} \in \omega_1; \\ +1, & \underline{x} \in \omega_2. \end{cases} \right\} \Rightarrow \forall \underline{x} \in Y, \delta_{\underline{x}} \cdot \text{sign}[g(\underline{x})] = +1. \quad (9)$$

⊛ Ισοδύναμα θα μπορούσαμε να γράψουμε ότι:

$$\forall \underline{x} \in Y, \delta_{\underline{x}} \cdot g(\underline{x}) = |g(\underline{x})| \quad (10)$$

\* θεωρείστε το παρακάτω στοιχειώδες ενός διαδοχικού προβλήματος ταξινόμησης στον χώρο των χαρακτηριστικών  $X = \mathbb{R}^2$ .



\* Γνωρίζουμε πως

$$\left\{ \begin{aligned} d(\underline{x}_A; g(\underline{x})) &= \frac{|g(\underline{x}_A)|}{\|\underline{w}\|} \quad (11) \\ d(\underline{x}_B; g(\underline{x})) &= \frac{|g(\underline{x}_B)|}{\|\underline{w}\|} \quad (12) \end{aligned} \right.$$

\* Σύμφωνα με την προηγούμενη ανάλυση, η συνάρτηση κόστους  $J(\underline{w})$  συζητείται υπολογίζοντας το στοιχειώδες σφάλμα για κάθε ένα από τα διανύσματα χαρακτηριστικών εκπαίδευσης. Μπορούμε να γράψουμε ότι:

$$\forall \underline{x} \in Y, e(\underline{x}) = \delta_{\underline{x}} \cdot g(\underline{x}) = |g(\underline{x})| = \|\underline{w}\| \cdot d(\underline{x}, g(\underline{x})) \quad (13)$$

$$e(\underline{x}) = \|\underline{w}\| \cdot d(\underline{x}, g(\underline{x})) \quad (14)$$

ή διαφορετικά

$$d(\underline{x}, g(\underline{x})) \propto e(\underline{x}), \forall \underline{x} \in Y \quad (15)$$



⊛ Η συνάρτηση κόστους  $J(\underline{w})$  λαμβάνει την ελάχιστη τιμή της, που συμβαίνει να είναι το μηδέν ( $\min_{\underline{w}} J(\underline{w}) = 0$ ), στην περίπτωση κατά την οποία δεν υπάρχει κανένα διάνυσμα χαρακτηριστικών που να ταξινομήσει λάθος.

⊛ Το συνολικιστικό κόστος  $J(\underline{w})$  αποτελεί μια γραμμική κατά τμήματα συνεχής συνάρτηση. (linear piecewise continuous function)

⊛ Πράγματι, αν το διάνυσμα των βαρών υποστεί μια ομαλή μεταβολή, η συνάρτηση κόστους  $J(\underline{w})$  θα μεταβληθεί γραμμικά μέχρι το σημείο όπου το σύνολο  $\mathcal{Y}$  αλλάξει.

⊛ Το διάνυσμα βαθμίδας (gradient vector  $\nabla_{\underline{w}} J(\underline{w})$ ) στο συγκεκριμένο σημείο δεν ορίζεται και η παράγωγος της συνάρτησης κόστους  $\frac{\partial J(\underline{w})}{\partial \underline{w}}$  δεν είναι συνεχής.

⊛ Ο αλγόριθμος ελαχιστοποίησης της συνάρτησης κόστους που σχετίζεται με το περιεχόμενο ακολουθεί το πνεύμα της μεθόδου της βαθμιαίας κατάβασης (gradient descent) και διατυπώνεται ως εξής:

$$\underline{w}(t+1) = \underline{w}(t) - \rho_t \cdot \left. \frac{\partial J(\underline{w})}{\partial \underline{w}} \right|_{\underline{w} = \underline{w}(t)} \quad (16)$$

όπου  $\underline{w}(t)$  είναι η εκτίμηση του διανύσματος των βαρών κατά την  $t$ -οστή επανάληψη και  $\rho_t$  μια ακολουθία θετικών πραγματικών αριθμών.

⊃ Λαμβάνοντας υπόψη το γεγονός πως η στήλη (16) ορίζεται εκτός των προαναφερθέντων συμβόλων ασυνέχειας, τότε για κάθε έξιμο συμβείο μπορούμε να δράψουμε ότι:

$$\frac{\partial J(\underline{w})}{\partial \underline{w}} = \sum_{x \in \gamma} \frac{\partial}{\partial \underline{w}} \{ \delta_x \cdot (\underline{w}^T \cdot \underline{x}) \} \Rightarrow$$

$$\frac{\partial J(\underline{w})}{\partial \underline{w}} = \sum_{x \in \gamma} \delta_x \cdot \frac{\partial}{\partial \underline{w}} \{ \underline{w}^T \cdot \underline{x} \} \Rightarrow$$

$$\frac{\partial J(\underline{w})}{\partial \underline{w}} = \sum_{x \in \gamma} \delta_x \cdot \underline{x} \quad [17]$$

⊃ Επομένως, μπορούμε να δράψουμε ότι:

$$\underline{w}(t+1) = \underline{w}(t) - \rho_t \cdot \sum_{x \in \gamma} \delta_x \cdot \underline{x} \quad [18]$$

⊛ Ο αλγόριθμος εκπαίδευσης του Perceptron σχετιοποιείται αναδιόρθωσης μια συνάρτηση αφκή τιμή στο δαύουστα των βαρών  $\underline{w}(t)$  ενώ σε κάθε επανάληψη διαφορούνεται ένα δαύουστα διόρθωσης (correction vector) το οποίο βασίζεται στο σύνολο των διασυστάσεων χαρακτηριστικών που ταξινομοούνται εσφαλμένα κατά την τρέχουσα επανάληψη:

$$\underline{\epsilon} = \sum_{x \in \gamma} \underline{e}_x \quad (19)$$

όπου

$$\underline{e}_x = \delta_x \cdot \underline{x} \quad (20)$$

⊛ Η διαδικασία ενημέρωσης των βαρών θα επαναλαμβάνεται μέχρι το σύνολο  $\gamma_t = \{\emptyset\}$ .

# Perceptron Algorithm

Assuming  $X = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$  from known classes  $\omega_1$  and  $\omega_2$ .

#11

1: Choose  $\underline{W}(0)$  randomly

2: Choose  $\rho_0$

3: Initialize  $t=0$

4: Repeat

4.1: Initialize  $Y = \{ \emptyset \}$

4.2: For  $i=1$  to  $N$

if  $(\delta x_i \cdot \underline{W}(t) \cdot x_i \geq 0)$  then  $Y = Y \cup \{x_i\}$

End { For }

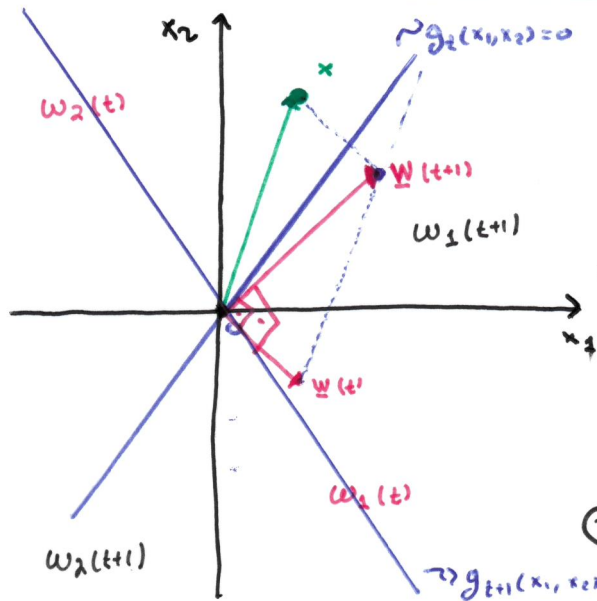
4.3:  $\underline{W}(t+1) = \underline{W}(t) - \rho_t \cdot \sum_{x \in Y} \delta x \cdot x$

4.4: Adjust  $\rho_t$

4.5: Increase  $t$ :  $t = t+1$

Until:  $Y = \{ \emptyset \}$

## Συναρτησιών Αναπαράσταση ως Δράσης του Perceptron



①: Υποθέτουμε πως κατά την εκτέλεση του ε-σίου βήματος του αλγορίθμου perceptron η τρέχουσα τιμή του διαυόσματος των βαρών ( $\underline{W}(t)$ ) είναι αυτή που φαίνεται στο σχήμα.

②: Αν το διάνυσμα  $x$  που φαίνεται στο σχήμα είναι το μοναδικό διάνυσμα χαρακτηριστικών που είναι εσφαλμένα ταξινομημένο με βάση την ευθεία  $g_2(x_1, x_2) = 0$  (που προσδιορίζεται από το διάνυσμα  $\underline{W}(t)$ ), τότε θα έχουμε ότι:  $Y_t = \{x\}$ . Έστω ότι  $\rho_t = 1$ .

③ Με βάση την τρέχουσα διαμόρφωση του σχήματος, το διάνυσμα  $x$  ανατίθεται εσφαλμένα στην κλάση  $\omega_2$  και κατά συνέπεια ανίχνη πραγματικά στην  $\omega_1$ , άρα  $x \in \omega_1$ . Αντί συμπλήρωμα ως  $\delta x = -1$ .

④ Κατά συνέπεια, το διάνυσμα ως διορθώσης του διαυόσματος των βαρών  $\underline{c}$  θα δίνεται από την σχέση:  $\underline{c} = \delta x \cdot x \Rightarrow \underline{c} = -x$ . Επομένως, το ανανεωμένο διάνυσμα των βαρών κατά την επανάληψη  $(t+1)$  θα δίνεται ως:  $\underline{W}(t+1) = \underline{W}(t) - \underline{c}_x \Rightarrow$

$$\underline{W}(t+1) = \underline{W}(t) - (-x) \Rightarrow \underline{W}(t+1) = \underline{W}(t) + x$$