

Ταξινομητές βασισμένοι στη θεωρία αποφάσεων κατά Bayes

ECE-TEL830 ΑΝΑΓΝΩΡΙΣΗ ΠΡΟΤΥΠΩΝ

Αθανάσιος Κούτρας

Αναπληρωτής Καθηγητής

Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών,
Παν. Πελοποννήσου

13 Μαρτίου 2023

Περίγραμμα διάλεξης

- 1 Εισαγωγή
- 2 Πιθανοτικοί Ταξινομητές
- 3 Η Gaussian σ.π.π.
- 4 Ταξινομητές ελάχιστης απόστασης
- 5 Εκτιμητής Μέγιστης Πιθανοφάνειας
- 6 Μοντέλα μίξης
- 7 Ο EM αλγόριθμος
- 8 Εκτιμητής με βάση πλησιέστερους γείτονες
- 9 Ο Naive Bayes ταξινομητής
- 10 Ο K-NN ταξινομητής

Υλικό μελέτης

Theodoridis S., Piskrakis, A., Koutroumbas K., Cavouras, D., "Εισαγωγή στην αναγνώριση προτύπων με MATLAB", ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1



Εισαγωγή

- Οι τεχνικές που θα παρουσιαστούν εδώ έχουν εμπνευστεί από τη θεωρία αποφάσεων του Bayes.
- Στα προβλήματα ταξινόμησης θέλουμε να ταξινομήσουμε ένα πρότυπο (pattern) σε μία από περισσότερες δυνατές κλάσεις c .
- για αρχή, θεωρούμε ότι ο αριθμός των κλάσεων είναι γνωστός εκ των προτέρων σε εμάς.
- Το κάθε πρότυπο το αναπαριστούμε με ένα σύνολο τιμών $x(i), i = 1, 2, \dots, l$ οι οποίες δημιουργούν ένα διάνυσμα l διαστάσεων το οποίο καλείται διάνυσμα χαρακτηριστικών

$$x = [x(1), x(2), \dots, x(l)]^T$$

- υποθέτουμε ότι κάθε πρότυπο αντιπροσωπεύεται με μοναδικό τρόπο από ένα και μόνο διάνυσμα χαρακτηριστικών και μπορεί να ανήκει μόνο σε μία κλάση.

Θεώρημα του Bayes

- δοθέντος ενός διανύσματος x και ενός συνόλου c κλάσεων $\omega_i, i = 1, 2, \dots, c$, σύμφωνα με το θεώρημα του Bayes ισχύει ότι:

$$P(\omega_i|x)p(x) = p(x|\omega_i)P(\omega_i)$$

και

$$p(x) = \sum_{i=1}^c p(x|\omega_i)P(\omega_i)$$

όπου:

- $P(\omega_i)$ είναι η εκ των προτέρων πιθανότητα της κλάσης $\omega_i, i = 1, 2, \dots, c$
- $P(\omega_i|x)$ είναι η εκ των υστέρων πιθανότητα της κλάσης ω_i δοθέντος του x ,
- $p(x)$ είναι η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του x
- $p(x|\omega_i)$ είναι η συνάρτηση της υπό συνθήκη πυκνότητας πιθανότητας του x δοθείσης της κλάσης ω_i (καλείται και πιθανοφάνεια της ω_i ως προς το x).

Θεωρία αποφάσεων του Bayes

- Έστω ότι δίνεται ένα πρότυπο αγνώστης κλάσης και έστω $x = [x(1), x(2), \dots, x(l)]^T$ το αντίστοιχο διάνυσμα χαρακτηριστικών.
- το διάνυσμα χαρακτηριστικών προκύπτει από μετρήσεις που μπορούμε να πραγματοποιήσουμε
- θεωρούμε για το πρόβλημα μας ότι υπάρχουν c δυνατές κλάσεις στις οποίες μπορεί να ταξινομηθεί το πρότυπο αγνώστης κλάσης, οι $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_c$
- Σύμφωνα με την θεωρία του Bayes, η απόφαση που μπορούμε να πάρουμε για την ταξινόμηση του αγνώστου προτύπου στην κλάση ω_i προκύπτει μετά την εξέταση της παρακάτω σχέσης:

$$P(\omega_i|x) > P(\omega_j|x) \forall j \neq i$$

- από την θεωρία πιθανοτήτων προκύπτει ότι ένας ταξινομητής Bayes είναι βέλτιστος υπό την έννοια ότι ελαχιστοποιεί την πιθανότητα σφάλματος.

Η Gaussian συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας

- η συνάρτηση αυτή χρησιμοποιείται εκτενώς στην αναγνώριση προτύπων λόγω του μαθηματικού υπόβαθρου που την συνοδεύει αλλά και λόγω του κεντρικού οριακού θεωρήματος.
- σύμφωνα με το θεώρημα αυτό, η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του αθροίσματος ενός πλήθους στατιστικώς ανεξάρτητων τυχαίων μεταβλητών, τείνει στην Gaussian συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας, όταν το πλήθος των όρων του αθροίσματος τείνει στο άπειρο.
- στην πράξη αυτό ισχύει κατά προσέγγιση για έναν αρκετά μεγάλο αριθμό όρων αθροίσματος.
- η μορφή της πολυμεταβλητής συνάρτησης Gauss είναι η:

$$p(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}} |S|^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-m)^T S^{-1}(x-m)\right)$$

όπου $m = E[x]$ είναι το μέσο διάνυσμα, S είναι ο πίνακας συνδιασποράς ο οποίος ορίζεται $S = E[(x-m)(x-m)^T]$ και $|S|$ είναι η ορίζουσα του πίνακα S .

- συχνά η Gaussian συνάρτηση καλείται και κανονική και χρησιμοποιείται ο συμβολισμός $N(m, S)$
- για την μονοδιάστατη περίπτωση, προκύπτει από τον παραπάνω τύπο η πιο γνώριμη μορφή:

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Ταξινομητές ελάχιστης απόστασης: Η περίπτωση της Ευκλείδειας απόστασης

- ο βέλτιστος Bayesian ταξινομητής απλοποιείται σημαντικά υιοθετώντας τις παρακάτω παραδοχές:
 - οι κλάσεις είναι ισοπίθανες
 - τα δεδομένα σε όλες τις κλάσεις ακολουθούν την κανονική κατανομή
 - το μητρώο (πίνακας) συνδιασποράς είναι ίδιο για όλες τις κλάσεις
 - το μητρώο συνδιασποράς είναι διαγώνιο και όλα τα στοιχεία της διαγωνίου είναι μεταξύ τους ίσα
- υπό αυτές τις προϋποθέσεις προκύπτει ότι ο βέλτιστος Bayesian ταξινομητής είναι ισοδύναμος με τον ταξινομητή ελάχιστης Ευκλείδειας απόστασης.
- το άγνωστο διάνυσμα x ταξινομείται στην κλάση ω_i αν

$$\|x - m_i\| = \sqrt{(x - m_i)^T(x - m_i)} < \|x - m_j\|, \forall i \neq j$$

- επειδή ο ταξινομητής αυτός είναι αρκετά απλός, χρησιμοποιείται αρκετά συχνά ακόμα και αν γνωρίζουμε ότι οι παραπάνω προϋποθέσεις δεν ισχύουν.
- αυτό που καταφέρνει είναι να ταξινομήσει ένα πρότυπο στην κλάση της οποίας μέση τιμή είναι πιο κοντά στο πρότυπο με βάση την Ευκλείδεια νόρμα.

Ταξινομητές ελάχιστης απόστασης: Η περίπτωση της απόστασης Mahalanobis

- ο ταξινομητής αυτός προκύπτει όταν χαλαρώσουμε τα παραπάνω κριτήρια και συγκεκριμένα αφαιρέσουμε την τελευταία υπόθεση (διαγώνιο μητρώο συνδιασποράς και τα στοιχεία της διαγωνίου να είναι ίσα μεταξύ τους)
- Σε αυτή την περίπτωση το διάνυσμα x ταξινομείται στην κλάση ω_i αν

$$\sqrt{(x - m_i)^T S^{-1} (x - m_i)} < \sqrt{(x - m_j)^T S^{-1} (x - m_j)}, \forall i \neq j$$

Εκτίμηση μέγιστης πιθανοφάνειας των παραμέτρων της Gaussian σ.π.π

- το πρόβλημα που αντιμετωπίζουμε σε κάποιες περιπτώσεις, είναι ότι μπορεί να μην γνωρίζουμε τις συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας που περιγράφουν τις στατιστικές κατανομές των δεδομένων στις κλάσεις
- η εκτίμηση αυτών των παραμέτρων θα πρέπει να γίνει με χρήση του συνόλου των δεδομένων εκπαίδευσης.
- η λύση είναι να υποθέσουμε ότι η εκάστοτε συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας υπακούουν σε μια συγκεκριμένη συνάρτηση, αλλά δεν γνωρίζουμε τις τιμές των παραμέτρων που καθορίζουν πλήρως την συνάρτηση αυτή.
- για παράδειγμα μπορεί να γνωρίζουμε ότι η κατανομή ακολουθεί την Gaussian κατανομή, αλλά δεν γνωρίζουμε την μέση τιμή και τα στοιχεία του μητρώου συνδιασποράς.
- προς αυτή την κατεύθυνση, ο εκτιμητής μέγιστης πιθανοφάνειας προσφέρει μια μέθοδο παραμετρικής εκτίμησης μιας άγνωστης συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας.

- στην περίπτωση που δίνονται N σημεία $x_i, i = 1, 2, \dots, N$ που είναι γνωστό ότι είναι κατανεμημένα σύμφωνα με την κανονική κατανομή, οι εκτιμήσεις της άγνωστης μέσης τιμής και του μητρώου συνδιασποράς δίνονται από τις σχέσεις:

$$m_{ML} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

$$\sigma_{ML} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - m_{ML})(x_i - m_{ML})^T$$

- συχνά, αντί για την μεταβλητή N , χρησιμοποιούμε στο άθροισμα για τον υπολογισμό του πίνακα συνδιασπορών το $N - 1$

Μοντέλα Μίξης

- Όταν δεν είναι γνωστή η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας που περιγράφει τα δεδομένα μιας κλάσης, τότε πρέπει να γίνει εκτίμηση τους πριν χρησιμοποιηθεί ο Bayesian ταξινομητής.
- μια από τις πιο γνωστές μεθόδους μοντελοποίησης άγνωστων συναρτήσεων πυκνότητας πιθανότητας, είναι η Μοντελοποίηση Μίξης.
- σύμφωνα με αυτή, κάθε συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας μπορεί να μοντελοποιηθεί ως γραμμικός συνδυασμός από J συναρτήσεις πυκνότητας ως

$$p(x) = \sum_{j=1}^J P_j p(x|j)$$

όπου

$$\sum_{j=1}^J P_j = 1, \int p(x|j) dx = 1$$

για μεγάλη τιμή του J .

- στην πράξη στις περισσότερες των περιπτώσεων, οι συναρτήσεις $p(x|j)$ επιλέγονται να είναι Gaussian.

Ο αλγόριθμος Expectation-Maximization (EM)

- θεωρούμε ότι διαθέτουμε ένα σύνολο από N σημεία, των οποίων οι στατιστικές ιδιότητες περιγράφονται από μια συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας όπως πριν.
- αυτό που θέλουμε είναι να χρησιμοποιήσουμε τα δεδομένα για να μπορέσουμε να εκτιμήσουμε τις παραμέτρους που συμμετέχουν στο προηγούμενο ανάπτυγμα:
- αυτές είναι οι πιθανότητες $P_j, j = 1, 2, \dots, J$ καθώς και οι παράμετροι που σχετίζονται με κάθε έναν από τους όρους $p(x|j), j = 1, 2, \dots, J$
- για παράδειγμα αν υποθέσουμε ότι κάθε μια από τις σ.π.π. του αθροίσματος είναι Gaussian με μητρώο συνδιασποράς $\sigma_j^2 I$:

$$p(x|j) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}} \sigma_j^I} \exp\left(-\frac{(x - m_j)^T (x - m_j)}{2\sigma_j^2}\right), j = 1, 2, \dots, J$$

τότε οι άγνωστες παράμετροι είναι οι μέσες τιμές $m_j, j = 1, 2, \dots, J$ (συνολικά IJ παράμετροι) και οι J διασπορές $\sigma_j^2, j = 1, 2, \dots, J$ (συνολικά J παράμετροι)

- ο EM αλγόριθμος υπολογίζει επαναληπτικά τις ζητούμενες παραμέτρους, ξεκινώντας από αρχικές τιμές που καθορίζονται από τον χρήστη.

Εκτίμηση πυκνότητας πιθανότητας με βάση τους k -πλησιέστερους γείτονες

- αν θεωρήσουμε ένα σύνολο N σημείων x_1, x_2, \dots, x_N που προέρχονται από μια άγνωστη στατιστική κατανομή. Ο στόχος είναι να εκτιμήσουμε την τιμή της άγνωστης σ.π.π. για κάποιο δεδομένο σημείο x
- ο εκτιμητής πυκνότητας πιθανότητας που βασίζεται στους k -πλησιέστερους γείτονες ακολουθεί τα παρακάτω βήματα:
 - 1 επιλέγουμε μια τιμή για το k (αριθμός γειτόνων)
 - 2 βρίσκουμε την απόσταση του x από κάθε σημείο του συνόλου της εκπαίδευσης $x_i, i = 1, 2, \dots, N$. Ως μέτρο απόστασης μπορεί να χρησιμοποιηθεί οποιοδήποτε όπως Ευκλείδεια, Mahalanobis κλπ.
 - 3 βρίσκουμε τους k πλησιέστερους γείτονες του x
 - 4 υπολογίζουμε το μέγεθος (όγκο) $V(x)$ της περιοχής στην οποία βρίσκονται οι k -πλησιέστεροι γείτονες
 - 5 υπολογίζουμε την εκτίμηση σύμφωνα με την

$$p(x) \approx \frac{k}{NV(x)}$$

Εκτίμηση πυκνότητας πιθανότητας με βάση τους k -πλησιέστερους γείτονες

Για την περίπτωση της Ευκλείδειας απόστασης ισχύει:

- $V(x) = 2\rho$ στον μονοδιάστατο χώρο
- $V(x) = \pi\rho^2$ στον δισδιάστατο χώρο
- $V(x) = \frac{4}{3}\pi\rho^3$ στον τρισδιάστατο χώρο

Ο Naive Bayes ταξινομητής

- σύμφωνα με τον ταξινομητή Naive Bayes, η εκτίμηση της σ.π.π. για κάποιο σημείο $x = [x(1), x(2), \dots, x(N)]^T$ δίνεται από τη σχέση

$$p(x) = \prod_{j=1}^l p(x(j))$$

- υποθέτουμε δηλαδή ότι τα στοιχεία του διανύσματος χαρακτηριστικών x είναι στατιστικώς ανεξάρτητα μεταξύ τους.
- μας είναι χρήσιμο σε περιπτώσεις μεγάλης διάστατης των διανυσμάτων χαρακτηριστικών καθώς αυτό οδηγεί στην απαίτηση για μεγάλο αριθμό και δεδομένων εκπαίδευσης για να έχουμε αξιόπιστη εκτίμηση της πολυδιάστατης σ.π.π.
- ακόμα και αν δεν ισχύει η υπόθεση της στατιστικής ανεξαρτησίας, στην περίπτωση του naive Bayes η απόδοση μπορεί να είναι καλή καθώς αξιόπιστες εκτιμήσεις για μονοδιάστατες σ.π.π. είναι εφικτές με σχετικά λίγα μόνο διαθέσιμα σημεία.

Ταξινομητής πλησιέστερων γειτόνων

- Είναι ένας από τους δημοφιλέστερους αν και παλιός ταξινομητής.
- Δίνονται c κλάσεις $\omega_i, i = 1, 2, \dots, c$ και ένα σημείο x και N σημεία εκπαίδευσης $x_i, i = 1, 2, \dots, N$ στον l -διάστατο χώρο μαζί με τις αντίστοιχες ετικέτες κλάσης.
- με δεδομένο το σημείο x του οποίου δεν γνωρίζουμε την κλάση, θέλουμε να το ταξινομήσουμε σε μια από τις παραπάνω κλάση.
- τα βήματα του ταξινομητή είναι τα ακόλουθα:
 - 1 φάξτε ανάμεσα στα N σημεία εκπαίδευσης τους k κοντινότερους γείτονες του x χρησιμοποιώντας ένα μέτρο απόστασης (π.χ. Ευκλείδεια, Mahalanobis κ.λ.π.). Η παράμετρος k καθορίζεται από τον χρήστη και δεν πρέπει να είναι πολλαπλάσιο του c
 - 2 προσδιορίστε ποιοι από τους k πλησιέστερους γείτονες ανήκουν στην κλάση ω_i . Προφανώς $\sum_{i=1}^c k_i = k$
 - 3 το x ταξινομείται σε εκείνη την κλάση ω_i για την οποία $k_i > k_j, j \neq i$
- Για μεγάλη τιμή του N , όσο μεγαλύτερο είναι το k , τόσο θα πλησιάσει σε απόδοση αυτή του Naive Bayes.
- για μικρές τιμές όμως, μεγάλες τιμές του k δεν είναι απαραίτητο ότι θα οδηγήσουν σε βελτίωση της απόδοσης αναγκαστικά.



Signal & Image Processing, Pattern Recognition Group (SIPPRE)
www.sippre-group.com