
Θεόδωρος Αλεξόπουλος, Αναπληρωτής Καθηγητής
ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ
ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ - ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ
ΗΡΩΩΝ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟΥ 9
ΑΘΗΝΑ 157 80
Τηλ: 210 772-3019, Fax: 210 772-3025
e-mail: theoalex@central.ntua.gr

Theodoros Alexopoulos, Associate Professor
NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY
DEPARTMENT OF PHYSICS
ZOGRAFOU CAMPUS
157 80 ATHENS - GREECE
Phone : +30 210 772-3019, Fax: +30 210 772-3025
e-mail: Theodoros.Alexopoulos@cern.ch
html://www.physics.ntua.gr/Faculty/theoalex

Αναγνώριση Προτύπων & Νευρωνικά Δίκτυα

Προβλήματα 2

(Επιστροφή: 12 Ιανουαρίου 2004)

0.1

Υπάρχουν διάφοροι τρόποι για να γενικεύσουμε την ιδέα των συναρτήσεων διάκρισης δύο κλάσεων σε C κλάσεις $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_k$. Ένας τρόπος θα είναι να χρησιμοποιήσουμε $(C-1)$ συναρτήσεις διάκρισης, έτσι ώστε αν $g_k(\vec{x}) > 0$ τότε το δείγμα $\vec{x} \in \omega_k$, ενώ αν $g_k(\vec{x}) < 0$ τότε $\vec{x} \notin \omega_k$. Με τη βοήθεια ενός παραδείγματος σε δύο διαστάσεις για $C = 3$ (τρεις κλάσεις), να δείξετε ότι αυτός ο τρόπος ταξινόμησης μπορεί να οδηγήσει σε περιοχές στο δειγματοχώρο των \vec{x} για τις οποίες η ταξινόμηση θα είναι ασαφής. Ένας άλλος τρόπος είναι να χρησιμοποιήσουμε μια συνάρτηση διάκρισης $g_{jk}(\vec{x})$ για κάθε δυνατό ζεύγος κλάσεων ω_j και ω_k , έτσι ώστε για $g_{jk}(\vec{x}) > 0$ το $\vec{x} \in \omega_j$ και για $g_{jk}(\vec{x}) < 0$ το $\vec{x} \in \omega_k$. Για C κλάσεις, απαιτούνται $C(C-1)/2$ συναρτήσεις διάκρισης. Με ένα απλό παράδειγμα σε δύο διαστάσεις για $C = 3$, να δείξετε ότι και αυτός ο τρόπος θα οδηγήσει σε ασαφείς περιοχές ταξινόμησης.

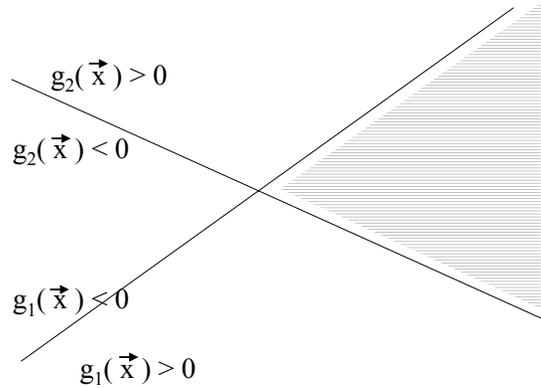
Λύση:

Για τρεις κλάσεις $C = 3$, θα υπάρχουν δύο γραμμικές συναρτήσεις διάκρισης $g_1(\vec{x})g_2(\vec{x})$. Θα ισχύει:
για $\vec{x} \in C_1$, τότε $g_1(\vec{x}) > 0$ και
για $\vec{x} \in C_2$, τότε $g_2(\vec{x}) > 0$.

Αυτό θα οδηγήσει στο ακόλουθο πρόβλημα. Πώς θα μπορέσουμε να ταξινομήσουμε δείγματα \vec{x} τα οποία έχουν την ιδιότητα:

$$g_1(\vec{x}) > 0 \quad \text{ΚΑΙ} \quad g_2(\vec{x}) > 0.$$

Προφανώς τέτοια \vec{x} θα ανήκουν και στις δύο κλάσεις, δηλαδή C_1 ΚΑΙ C_2 . Το σχήμα 1 περιγράφει αυτό το πρόβλημα. Ακόμη και στην περίπτωση που θεωρήσουμε τις δύο συναρτήσεις διάκρισης παράλληλες μεταξύ



Σχήμα 1: Οι δύο γραμμικές συναρτήσεις διάκρισης προφανώς ορίζουν περιοχή του χώρου (γραμμοσκιασμένη περιοχή) που ταξινομείται στις δύο κλάσεις συγχρόνως.

τους, δε θα έχουμε λύση του προβλήματος, καθότι η τομή των $g_1(\vec{x}) > 0$ ΚΑΙ $g_2(\vec{x}) > 0$ είναι ένα μη-κενό σύνολο. Παρατηρείστε ότι η τομή των $g_1(\vec{x}) > 0$ ΚΑΙ $g_2(\vec{x}) > 0$ είναι ένα κενό σύνολο μόνο στην περίπτωση που οι δύο γραμμικές συναρτήσεις διάκρισης συμπίπτουν, που σημαίνει $g_1(\vec{x}) = g_2(\vec{x})$.

Για τρεις κλάσεις $C = 3$, θα υπάρχουν $C(C - 1)/2 = 3$ συναρτήσεις διάκρισης, $g_{12}(\vec{x}), g_{13}(\vec{x}), g_{23}(\vec{x})$. Ο κανόνας ταξινόμησης θα είναι ως ακολούθως:

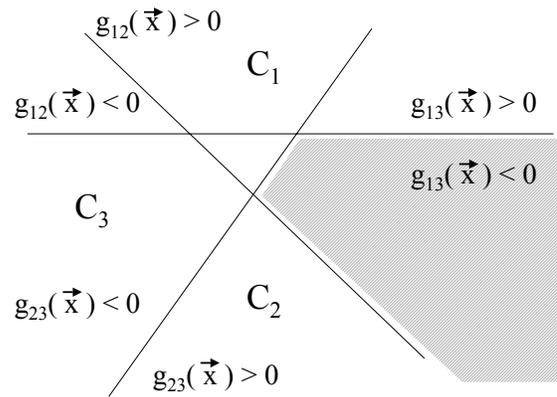
1. Αν $g_{12}(\vec{x}) > 0$ ΚΑΙ $g_{13}(\vec{x}) > 0$, τότε $\vec{x} \in C_1$.
2. Αν $g_{12}(\vec{x}) < 0$ ΚΑΙ $g_{23}(\vec{x}) > 0$, τότε $\vec{x} \in C_2$.
3. Αν $g_{13}(\vec{x}) < 0$ ΚΑΙ $g_{23}(\vec{x}) < 0$, τότε $\vec{x} \in C_3$.

Αυτός ο κανόνας ταξινόμησης οδηγεί στο ακόλουθο πρόβλημα, όπως φαίνεται στο σχήμα 6. Η ακόλουθη περιοχή δε μπορεί να ταξινομηθεί.

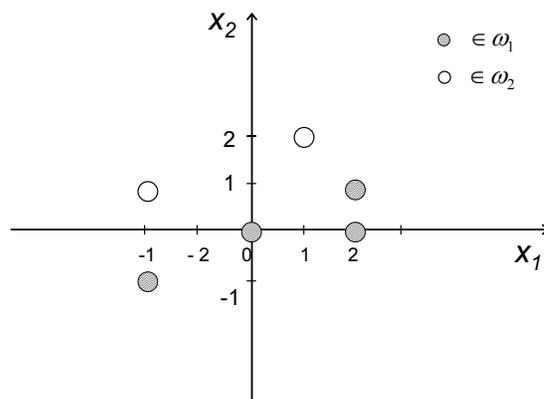
1. $g_{12}(\vec{x}) < 0$ ΚΑΙ $g_{13}(\vec{x}) > 0$.
2. $g_{12}(\vec{x}) > 0$ ΚΑΙ $g_{23}(\vec{x}) > 0$ ΚΑΙ $g_{13}(\vec{x}) < 0$.

0.2

Έστω τα 6 δείγματα εκπαίδευσης που ανήκουν σε δύο κλάσεις ω_1, ω_2 , όπως φαίνονται στο σχήμα (3):



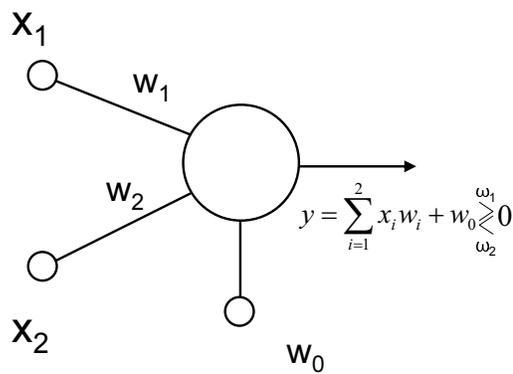
Σχήμα 2: Οι τρεις συναρτήσεις διάκρισης προφανώς ορίζουν περιοχή του χώρου που δεν ταξινομείται.



Σχήμα 3:

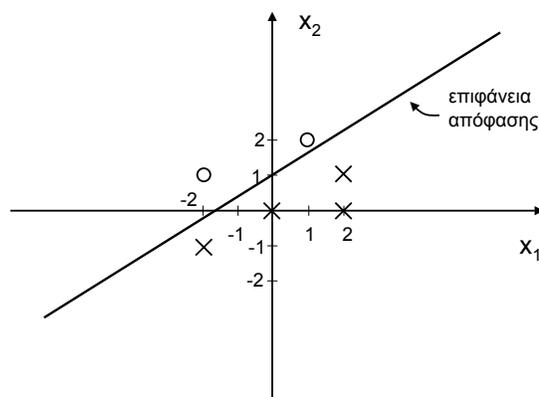
$$S = \left\{ \underbrace{\begin{pmatrix} -2 \\ 1 \end{pmatrix}}_{\omega_2}, \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}}_{\omega_2}, \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}}_{\omega_1}, \underbrace{\begin{pmatrix} -2 \\ -1 \end{pmatrix}}_{\omega_1}, \underbrace{\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}}_{\omega_1}, \underbrace{\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}}_{\omega_1} \right\}.$$

Να ορίσετε ένα νευρώνα (perceptron) που να ορίσει την ταξινόμηση αυτών των δύο κλάσεων. Δηλαδή, ορίστε τις συνάψεις w_1, w_2 και το κατώφλι w_0 .



Σχήμα 4:

Λύση:



Σχήμα 5:

Προφανώς η επιφάνεια απόφασης είναι:

$$x_2 = \frac{1}{2}x_1 + 1$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2}x_1 - x_2 + 1 = 0,$$

όπως φαίνεται στο σχήμα 5. Επομένως η εξίσωση αυτή μπορεί να θεωρηθεί ως :

$$w_1x_1 + w_2x_2 + w_0 = 0, \tag{1}$$

όπου

$$w_1 = \frac{1}{2}, \quad w_2 = -1, \quad \text{και } w_0 = -1,$$

ή

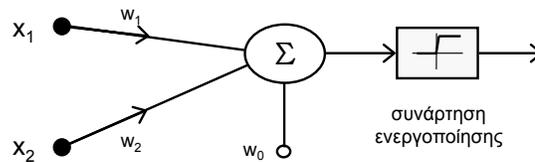
$$\vec{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad w_0 = -1,$$

και η εξίσωση (1) είναι:

$$\vec{w}^t \vec{x} + w_0 = 0,$$

με

$$\vec{x} = (x_1 \ x_2)^t.$$



Σχήμα 6:

Άρα η ταξινόμηση έχει ως ακολούθως:

$$\omega_1 : \left\{ \begin{array}{l} (-2 \ 1) \rightarrow \vec{w}^t \vec{x} + w_0 = -1 < 0 \\ (1 \ 2) \rightarrow \vec{w}^t \vec{x} + w_0 = -1/2 < 0 \end{array} \right\}$$

$$\omega_2 : \left\{ \begin{array}{l} (0 \ 0) \rightarrow \vec{w}^t \vec{x} + w_0 = 1 > 0 \\ (-2 \ -1) \rightarrow \vec{w}^t \vec{x} + w_0 = 1 > 0 \\ (2 \ 0) \rightarrow \vec{w}^t \vec{x} + w_0 = 2 > 0 \\ (2 \ 1) \rightarrow \vec{w}^t \vec{x} + w_0 = 1 > 0 \end{array} \right\}.$$

0.3

Θεωρείστε τον αλγόριθμο της απότομης πτώσης (steepest descent) όπου η συνάρτηση κόστους $J(w) = k_1(w - w_0)^2 + k_2$.

(α) Βρείτε τη βέλτιστη λύση w^* που ελαχιστοποιεί τη συνάρτηση κόστους $J(w)$.

(β) Με τη βοήθεια του αλγορίθμου της απότομης πτώσης:

$$w(i+1) = w(i) + \rho \frac{dJ}{dw},$$

να βρείτε μια αναλυτική έκφραση του $w(i)$. Θυμηθείτε πώς επιλύαμε διαφοροεξισώσεις από την Ανάλυση Σήματος! Να βρείτε τη συνθήκη που πρέπει να υπακούει η παράμετρος του ρυθμού εκμάθησης ρ , ώστε ο αλγόριθμος της απότομης πτώσης να συγκλίνει.

(γ) Να βρείτε το όριο του $w(i)$ για $i \rightarrow \infty$.

Λύση:

(α)

$$\frac{dJ}{dw} = 2k_1(w - w_0) = 0$$

$$\Rightarrow w^* = w_0.$$

(β)

Ο αλγόριθμος της απότομης πτώσης θα είναι:

$$w(i+1) = w(i) + 2\rho k_1(w(i) - w_0)$$

$$\Rightarrow w(i+1) = (1 - 2\rho k_1)w(i) + 2\rho k_1 w_0$$

$$\Rightarrow w(i) = (1 - 2\rho k_1)^i w(0) + \sum_{j=0}^{i-1} (1 - 2\rho k_1)^j 2\rho k_1 w_0$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow w(i) &= (1 - 2\rho k_1)^i w(0) + \frac{2\rho k_1 w_0}{1 - (1 - 2\rho k_1)} \\ \Rightarrow w(i) &= (1 - 2\rho k_1)^i w(0) + w_0.\end{aligned}\tag{2}$$

Επομένως το w_i για να συγκλίνει, θα πρέπει να ισχύει:

$$|1 - 2\rho k_1| < 1$$

$$-1 < 1 - 2\rho k_1 < 1$$

$$\frac{1}{k_1} < \rho < 0$$

(γ)

Από τη σχέση (2):

$$\lim_{i \rightarrow \infty} w(i) = w(0).$$

0.4

Έστω \vec{x} είναι μια τυχαία μεταβλητή με μέση τιμή $\vec{\mu}$ και πίνακα διασποράς $\vec{\Sigma}$. Να δείξετε ότι ο $\vec{\Sigma}$ είναι θετικά ορισμένος, δηλαδή να δείξετε ότι:

$$\vec{y}^t \vec{\Sigma} \vec{y} > 0 \quad \forall \vec{y} \neq 0.$$

Λύση:

Έστω \vec{y} ένα μη μηδενικό διάνυσμα. Τότε:

$$\begin{aligned}\vec{y}^t \vec{\Sigma} \vec{y} &= \vec{y}^t E [(\vec{x} - \vec{\mu})(\vec{x} - \vec{\mu})^t] \vec{y} \\ &= E [\vec{y}^t (\vec{x} - \vec{\mu})(\vec{x} - \vec{\mu})^t \vec{y}].\end{aligned}\tag{3}$$

Ορίζουμε μια νέα βαθμωτή μεταβλητή:

$$A = \vec{y}^t (\vec{x} - \vec{\mu}).\tag{4}$$

Παρατηρούμε ότι το A είναι μια τυχαία μεταβλητή με μέση τιμή μηδέν. Από τις σχέσεις (3) και (4) θα έχουμε:

$$\vec{y}^t \vec{\Sigma} \vec{y} = E[A^2] = \sigma_A^2 > 0,$$

όπου σ_A είναι η διασπορά της τυχαίας μεταβλητής A .

0.5

Έστω το διάνυσμα $\vec{x} = (x_1 \ x_2)^t$ είναι κατανεμημένο κατά Gauss με πυκνότητες πιθανότητας $p(\vec{x} / \omega_i) \sim N(\vec{\mu}_i, \sigma^2 I)$. Να σχεδιάσετε τις επιφάνειες απόφασης για ένα ταξινομητή ελάχιστης ευκλείδειας απόστασης αν έχουμε 5 κλάσεις με τις ακόλουθες μέσες τιμές:

$$\vec{\mu}_1 = (0 \ 0)^t,$$

$$\vec{\mu}_2 = (2 \ 0)^t,$$

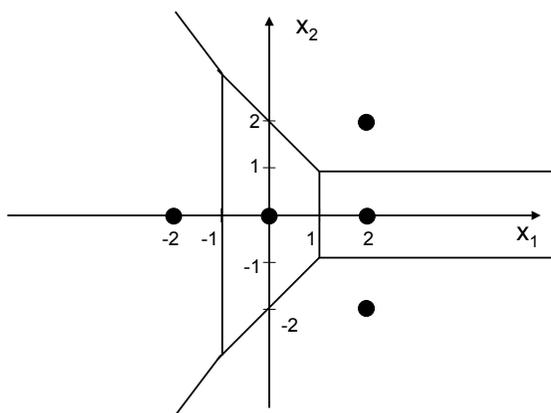
$$\vec{\mu}_3 = (-2 \ 0)^t,$$

$$\vec{\mu}_4 = (2 \ 2)^t,$$

$$\vec{\mu}_5 = (2 \ -2)^t.$$

Λύση:

Οι επιφάνειες απόφασης για τις πέντε κλάσεις φαίνονται στο σχήμα 7.



Σχήμα 7:

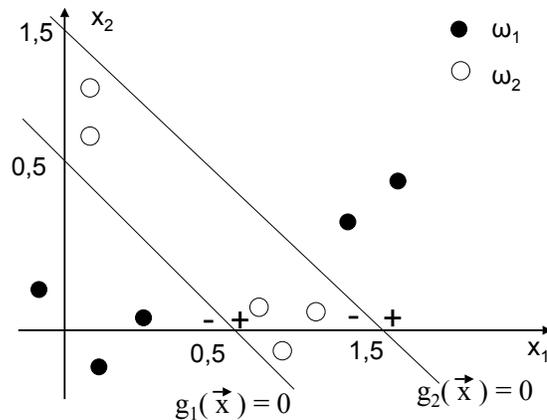
0.6

Δίνονται τα παρακάτω διανύσματα εκπαίδευσης:

$$S = \left\{ \underbrace{\left(\begin{array}{c} 0,1 \\ 0,2 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} 0,2 \\ 0,1 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} -0,15 \\ 0,2 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} 1,1 \\ 0,8 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} 1,2 \\ 1,1 \end{array} \right)}_{\omega_1}, \right. \\ \left. \underbrace{\left(\begin{array}{c} 1,1 \\ -0,1 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} 1,25 \\ 0,15 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} 0,9 \\ 0,1 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} 0,1 \\ 1,2 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} 0,2 \\ 0,9 \end{array} \right)}_{\omega_2} \right\}.$$

Να δείξετε γραφικά ότι αυτά δεν είναι γραμμικά διαχωρίσιμα γεγονότα, και να σχεδιαστεί μια κατάλληλη αρχιτεκτονική Perceptron που να τα διαχωρίζει.

Λύση:



Σχήμα 8:

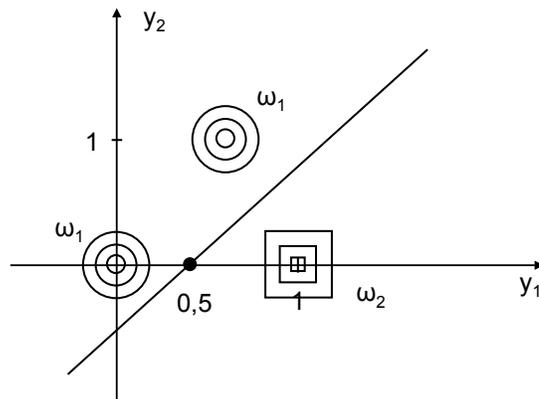
Από το σχήμα 8, προφανώς οι δύο κλάσεις δεν είναι γραμμικά διαχωρίσιμες. Μπορούμε να διαλέξουμε δύο ευθείες:

$$2x_1 + 2x_2 - 1 = 0, \quad \text{και}$$

$$2x_1 + 2x_2 - 3 = 0,$$

ώστε τα δείγματα της κλάσης ω_1 να βρεθούν μεταξύ των δύο επιφανειών διάκρισης. Θα χρειαστούμε δύο στρώματα για τη σχεδίαση του Perceptron. Το κρυφό στρώμα θα περιέχει δύο νευρώνες με εξόδους y_1, y_2 . Ο χώρος y_1, y_2 φαίνεται στο σχήμα 9.

x_1	x_2	y_1	y_2
0,1	-0,2	0	0
0,2	0,1	0	0
-0,15	0,2	0	0
1,1	0,8	1	1
1,2	1,1	1	1
1,1	-0,1	1	0
1,25	0,16	1	0
0,9	0,1	1	0
0,1	1,2	1	0
0,2	0,9	1	0



Σχήμα 9:

Δηλαδή θα μπορούσαμε να έχουμε μια επιφάνεια απόφασης:

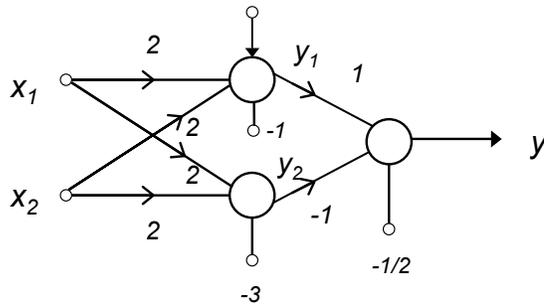
$$y_1 - y_2 - \frac{1}{2} = 0,$$

που μπορεί να διαχωρίσει τα ω_1, ω_2 , όπως φαίνεται στο σχήμα. Επομένως το νευρωνικό δίκτυο θα είναι αυτό που φαίνεται στο σχήμα 10.

0.7

Υποθέστε ότι δύο σύνολα S_1 και S_2 στο χώρο \mathbb{R}^l είναι γραμμικά διαχωρίσιμα. Δηλαδή, υπάρχει ένα διάνυσμα $\vec{w}' \in \mathbb{R}^l$ και ένα βαθμωτό $w_0 \in R$, έτσι ώστε:

$$\vec{w}'^t \vec{x} + w_0 = \begin{cases} > 0 & \forall \vec{x} \in S_1 \\ < 0 & \forall \vec{x} \in S_2 \end{cases}$$



Σχήμα 10:

Θεωρείστε τα νέα διανύσματα ως ακολούθως:

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} \vec{x} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{w} = \begin{pmatrix} \vec{w}' \\ w_0 \end{pmatrix}.$$

(α) Να δείξετε ότι $\vec{w}^t \hat{x} > 0 \forall \hat{x}$, αν το πρόσημο των διανυσμάτων \hat{x} του συνόλου S_2 αλλάζει.

(β) Να περιγράψετε γραφικά τί συμβαίνει στο ερώτημα (α) όταν $l = 1, S_1 = \{-3, -2, -1\}$, και $S_2 = \{5, 6, 7\}$.

Λύση:

(α)

Προφανώς ισχύει:

$$\vec{w}^t \vec{x} - w_0 = (\vec{w}' \ w_0) \begin{pmatrix} \vec{x} \\ 1 \end{pmatrix} = \vec{w}^t \hat{x}.$$

Αν $\vec{x} \in S_1 \Rightarrow \vec{w}^t \hat{x} > 0$.

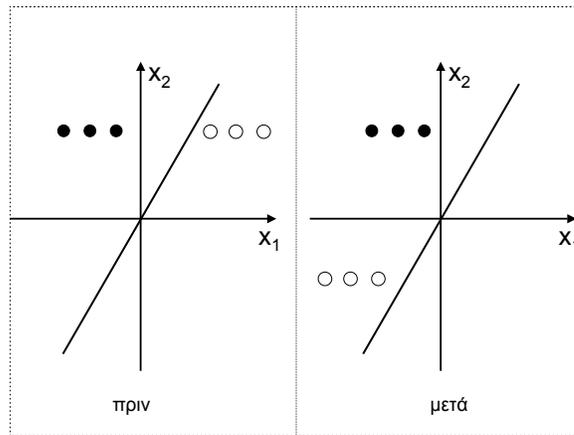
Αν $\vec{x} \in S_2 \Rightarrow \vec{w}^t \hat{x} < 0 \Rightarrow \vec{w}^t (-1)\hat{x} > 0$.

Επομένως αν το πρόσημο του \hat{x} αλλάζει όταν το $\vec{x} \in S_2$, θα ισχύει η σχέση

$$\vec{w}^t \hat{x} > 0 \quad \forall \hat{x}.$$

(β)

Η αλλαγή του προσήμου περιγράφεται στο σχήμα 11. Μετά από την αλλαγή της μεταβλητής σε \hat{x} και την αλλαγή του προσήμου όλα τα δείγματα βρίσκονται στην ίδια πλευρά της επιφάνειας απόφασης.



Σχήμα 11:

0.8

Στον αλγόριθμο του νευρώνα (Perceptron) έχουμε:

$$\vec{w}(i+1) = \vec{w}(i) + \rho(i) \vec{x}_i,$$

όταν το \vec{x}_i έχει ταξινομηθεί λανθασμένα, δηλαδή,

$$\vec{w}^t \vec{x}_i < 0.$$

Να βρείτε τη συνθήκη που διέπει την παράμετρο του ρυθμού εκμάθησης $\rho(i)$, έτσι ώστε το \vec{x} να ταξινομηθεί ορθά στο βήμα $i+1$.

Λύση:

Αν $\vec{w}(i)^t \vec{x}_i < 0$, τότε το \hat{x}_i έχει ταξινομηθεί λανθασμένα στο i -οστό βήμα του αλγορίθμου. Επομένως για να έχουμε τη σωστή ταξινόμηση του \vec{x}_i στο επόμενο βήμα, το $\vec{w}(i)$ θα πρέπει να αλλάξει με τέτοιο τρόπο ώστε $\vec{w}(i+1)^t \vec{x}_i > 0$. Ο αλγόριθμος είναι:

$$\vec{w}(i+1) = \vec{w}(i) + \rho \vec{x}_i$$

$$\Rightarrow \vec{w}(i+1)^t \vec{x}_i = (\vec{w}(i) + \rho \vec{x}_i)^t \vec{x}_i$$

$$\Rightarrow \vec{w}(i+1)^t \vec{x}_i = \vec{w}^t \vec{x}_i + \rho \|\vec{x}_i\|^2 > 0$$

$$\Rightarrow \rho > \frac{-\vec{w}^t \vec{x}_i}{\|\vec{x}_i\|^2}.$$

0.9

Έστω ότι τα σύνολα S_1, S_2 είναι γραμμικά διαχωρίσιμα, και έχουμε γεγονότα εκπαίδευσης $x_1 = -2 \in S_1, x_2 = -1 \in S_2$ και $x_3 = 2 \in S_2$. Η αρχική τιμή του διανύσματος \vec{w} είναι $\vec{w}(0) = (1, 1)^t$, και η παράμετρος του ρυθμού εκμάθησης είναι $\rho = 0,5$. Να προσδιοριστεί το διάνυσμα \vec{w} ώστε ο αλγόριθμος του Perceptron να μας δώσει την ορθή ταξινόμηση.

Λύση:

Θα χρησιμοποιήσουμε τον αλγόριθμο του Perceptron. Σε κάθε βήμα του αλγορίθμου, θα κανονικοποιούμε τα διανύσματα βάρους $\hat{w} = \vec{w} / \|\vec{w}\|$. Η ορθότητα της ταξινόμησης θα ελέγχεται για κάθε βήμα. Τα διανύσματα βάρους θα δίνονται από τη σχέση:

$$\hat{w}(i+1) = \hat{w}(i) - 0,5 \sum_{i=1}^3 \sigma_{x_i} \vec{x}_i,$$

όπου $\sigma_{x_i} = -1$ αν το δείγμα $\vec{x}_i \in \omega_1$ αλλά ταξινομείται στην κλάση ω_2 , ή $\sigma_{x_i} = +1$ αν το δείγμα $\vec{x}_i \in \omega_2$ αλλά ταξινομείται στην κλάση ω_1 , και σε όλες τις περιπτώσεις $\sigma_{x_i} = 0$.

Βήμα αλγορίθμου	Διάνυσμα βάρους	Κανονικοποιημένο διάνυσμα βάρους	Δείγματα με λάθος ταξινόμηση
0	$\vec{w} = (1 \ 1)^t$	$(0,707 \ 0,707)^t$	x_1, x_3
1	$\vec{w} = (-1,29 \ 0,71)^t$	$(-0,88 \ 0,48)^t$	x_2
2	$\vec{w} = (-0,38 \ -0,02)^t$	$(-1,00 \ -0,05)^t$	x_2
3	$\vec{w} = (-0,50 \ -0,55)^t$	$(-0,67 \ -0,74)^t$	κανένα

0.10

(α) Να εφαρμόσετε τον απλό αλγόριθμο εύρεσης των προτύπων για τα διανύσματα:

$$S = \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -5 \\ -4 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -5 \\ -5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -4 \\ -5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}.$$

Θεωρείστε ότι το κατώφλι $T = 3$.

(β) Να εφαρμόσετε τη μέθοδο *MaxMin* στο δειγματοχώρο S του ερωτήματος (α).

(γ) Να εφαρμόσετε τη μέθοδο των K -μέσων (**K-means**) στο δειγματοχώρο S του ερωτήματος (α).

Λύση:

(α) Είναι παρόμοια της άσκησης ;;

(β) βλέπε άσκηση ;;

(γ) βλέπε άσκηση ;;