UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Escola Tècnica Superior d'Enginyeria **Informàtica**

etsinf

Tema 6. Representación basada en Kernels y LDA

Percepción (PER)

Curso 2021/2022

Departamento de Sistemas Informáticos y Computación

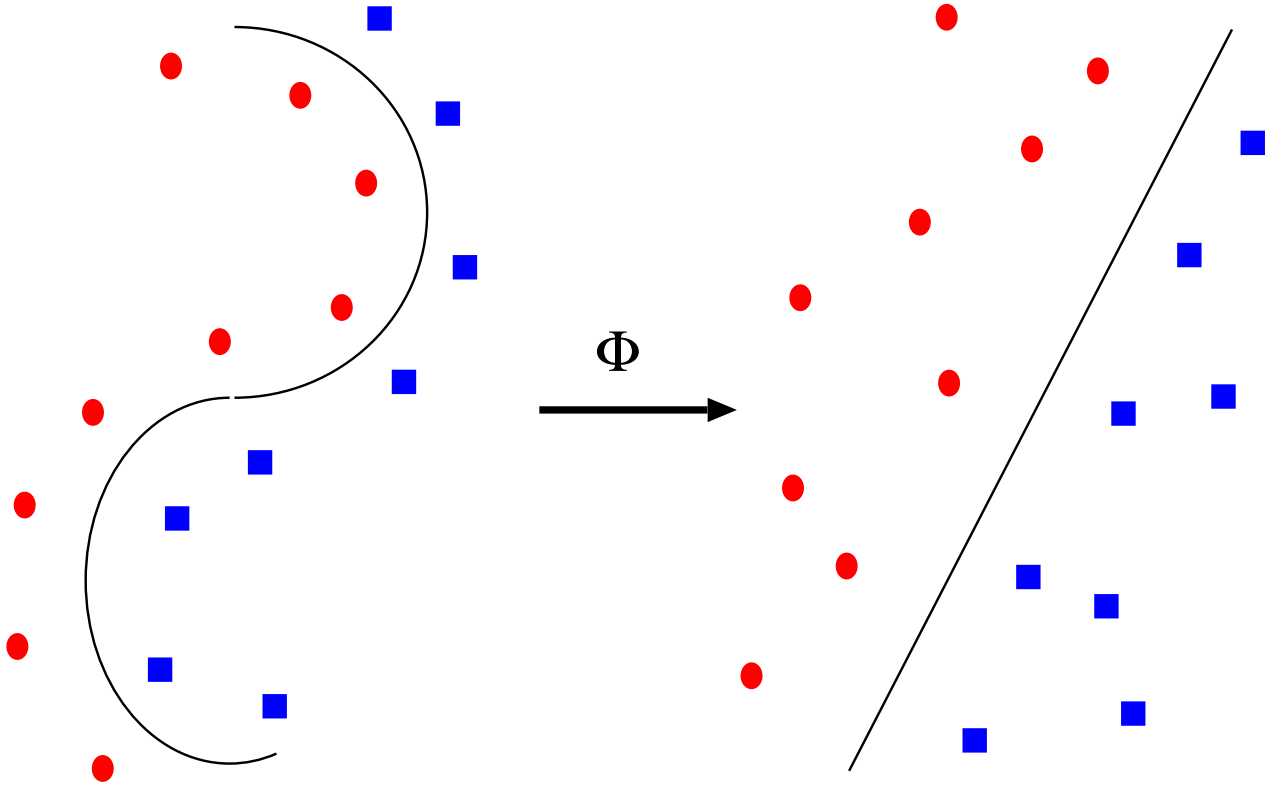
Índice

Índice

Introducción

Motivación de la representación basada en kernels:

Proyección a espacio de mayor dimensionalidad para obtener separabilidad lineal



Introducción

Motivación de *Linear Discriminant Analysis* (LDA):

Proyección a espacio de menor dimensionalidad para obtener separabilidad lineal

Diferencias con PCA:

- Técnica de reducción de dimensionalidad ***supervisada***
- Búsqueda de proyección W considera la clase de cada muestra de forma que
  - Maximiza separación entre muestras de diferente clase
  - Minimiza separación entre muestras de la misma clase
- Dimensiones a las cuales se proyecta depende del número de clases
- Se basa en el cálculo de valores y vectores propios ***generalizados***

Índice

Clasificación binaria y kernels

Los métodos kernel se estudian habitualmente en clasificación binarios:

- Conjunto de entrenamiento

$$X = \{(\mathbf{x}_1, c_1), (\mathbf{x}_2, c_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, c_N)\} \quad \text{con} \quad c_n \in \{-1, +1\}$$

- La clasificación de una nueva muestra $\mathbf{x}$ se realiza por el signo de una función discriminante $g(\mathbf{x})$:

$$c(\mathbf{x}) = \begin{cases} +1 & \text{si} \quad g(\mathbf{x}) \geq 0 \\ -1 & \text{si} \quad g(\mathbf{x}) < 0 \end{cases}$$

- El algoritmo Perceptron se puede reescribir para la clasificación en dos clases

Aprendizaje - Perceptron de 2 clases

- Entrada: $X = \{(\mathbf{x}_1, c_1), (\mathbf{x}_2, c_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, c_N)\}$ y factor de aprendizaje α
- Salida: $\mathbf{w}$ y w_0 // vector de pesos entrenados y término independiente
- Algoritmo:

$\mathbf{w} = \mathbf{0}$; $w_0 = 0$ // vector de pesos iniciales y peso umbral nulos
do
    $m = 0$; // número de muestras bien clasificadas
    for $(n = 1; n \leq N; n{+}{+})$
        $g(\mathbf{x}_n) = \mathbf{w}^t \cdot \mathbf{x}_n + w_0$
        if $c_n \cdot g(\mathbf{x}_n) \leq 0$ **then** // Si hay un error de clasificación
            $\mathbf{w} = \mathbf{w} + \alpha\, c_n\, \mathbf{x}_n$; $w_0 = w_0 + \alpha\, c_n$
        else
            $m = m + 1$
while $(m < N)$

Aprendizaje - Perceptron de 2 clases

- Entrada: $X = \{(\mathbf{x}_1, c_1), (\mathbf{x}_2, c_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, c_N)\}$,
  factor de aprendizaje $\alpha \in \mathbb{R}^N \wedge \alpha_i = \alpha_j \; \forall i, j$
- Salida: $g(\mathbf{x})$ // función de clasificación
- Algoritmo:

$g(\mathbf{x}) = 0$
do
  $m = 0$; // número de muestras bien clasificadas
  for $(n = 1; n \leq N; n{+}{+})$

    if $c_n \cdot g(\mathbf{x}_n) \leq 0$ **then** // Si hay un error de clasificación
      $g(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) + \alpha_n \, c_n \, (\mathbf{x}_n^t \cdot \mathbf{x}) + \alpha_n \, c_n$
    else
      $m = m + 1$;
while $(m < N)$

Clasificación binaria y kernels

$g(\mathbf{x})=\mathbf{w}^t\cdot\mathbf{x}+w_0$ es un clasificador con vector de pesos $\mathbf{w}$ y peso umbral w_0:

$$\mathbf{w}=\sum_{n=1}^{N}\alpha_n\,c_n\,\mathbf{x}_n \qquad w_0=\sum_{n=1}^{N}\alpha_n\,c_n$$

$g(\mathbf{x})$ relaciona $\mathbf{x}$ con algunas muestras de entrenamiento por el producto escalar y α_i pasa de factor de aprendizaje al peso de cada muestra:

$$g(\mathbf{x})=\sum_{n=1}^{N}\alpha_n\,c_n\,(\mathbf{x}_n^t\cdot\mathbf{x})+\alpha_n\,c_n$$

Generalizar producto escalar para resolver tareas no linealmente separables

Cambio por una función ***kernel*** $K(\mathbf{x}_n,\mathbf{x})$: proyecta a un espacio donde las muestras son linealmente separables y realiza el producto escalar

La proyección es **implícita** y se obtiene al calcular la función kernel:
$g(\mathbf{x})=\sum_{n=1}^{N}\alpha_n\,c_n\,K(\mathbf{x}_n,\mathbf{x})+\alpha_n\,c_n=\sum_{n=1}^{N}\alpha_n\,c_n\,(\Phi(\mathbf{x}_n^t)\cdot\Phi(\mathbf{x}))+\alpha_n\,c_n$

Clasificación binaria y kernels

Función kernel: función que dado un par de objetos del espacio de representación original nos devuelve un valor real:

$$K : E \times E \to \mathbb{R}$$

Usualmente la representación es vectorial, entonces:

$$K : \mathbb{R}^D \times \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}$$

Dicho valor real modela el producto escalar de esos dos objetos en un nuevo espacio de representación:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \Phi(\mathbf{x}) \cdot \Phi(\mathbf{y})$$

La representación alternativa no se llega a producir, sólo se necesita el ***resultado*** del producto escalar en esa representación para usarlo en un clasificador lineal

Índice

Aprendizaje - Kernel Perceptron

El algoritmo Kernel Perceptron aprende la siguiente función:

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \, c_n \, K(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}) + \alpha_n \, c_n$$

Es decir, **una función lineal en un espacio de representación alternativo**:

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w} \, \Phi(\mathbf{x}) + w_0$$

con

$$\mathbf{w} = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \, c_n \, \Phi(\mathbf{x}_n) \qquad w_0 = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \, c_n$$

Los únicos parámetros a aprender son los α_n

En fase de aprendizaje la función kernel se representa por una matriz $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ tal que $\mathbf{K}_{i,j} = K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ (***matriz Gramm***)

Aprendizaje - Kernel Perceptron

Desde el punto de vista de la función a aprender:

- Entrada: $X = \{(\mathbf{x}_1, c_1), (\mathbf{x}_2, c_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, c_N)\}$
- Salida: $g(\mathbf{x})$
- Algoritmo:

$g(\mathbf{x}) = 0$;
do
    $m = 0$; // número de muestras bien clasificadas
    for $(n = 1; n \leq N; n{+}{+})$
        if $c_n \cdot g(\mathbf{x}_n) \leq 0$ **then** // Si hay un error de clasificación
            $g(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) + c_n\, K(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}) + c_n$
        else
            $m = m + 1$
while $(m < N)$

Aprendizaje - Kernel Perceptron

Desde el punto de vista de los parámetros α:

- Entrada: $X = \{(\mathbf{x}_1, c_1), (\mathbf{x}_2, c_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, c_N)\}$
- Salida: $\alpha \in \mathbb{R}^N$
- Algoritmo:

$\alpha = \mathbf{0}$;
do
    $m = 0$; // número de muestras bien clasificadas
    for $(n = 1; n \leq N; n{+}{+})$
        if $c_n \cdot g(\mathbf{x}_n) \leq 0$ **then** // Si hay un error de clasificación
            $\alpha_n = \alpha_n + 1$
        else
            $m = m + 1$
while $(m < N)$

Índice

Tipos de Kernel

Entre los más usados están el ***polinomial*** y el ***gaussiano*** (o radial)

Kernel polinomial:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{x}^t \cdot \mathbf{y} + c)^d$$

Ejemplo $d = 2$

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left(\begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} + c \right)^2 = (x_1\, y_1 + x_2\, y_2 + c)\,(x_1\, y_1 + x_2\, y_2 + c)$$

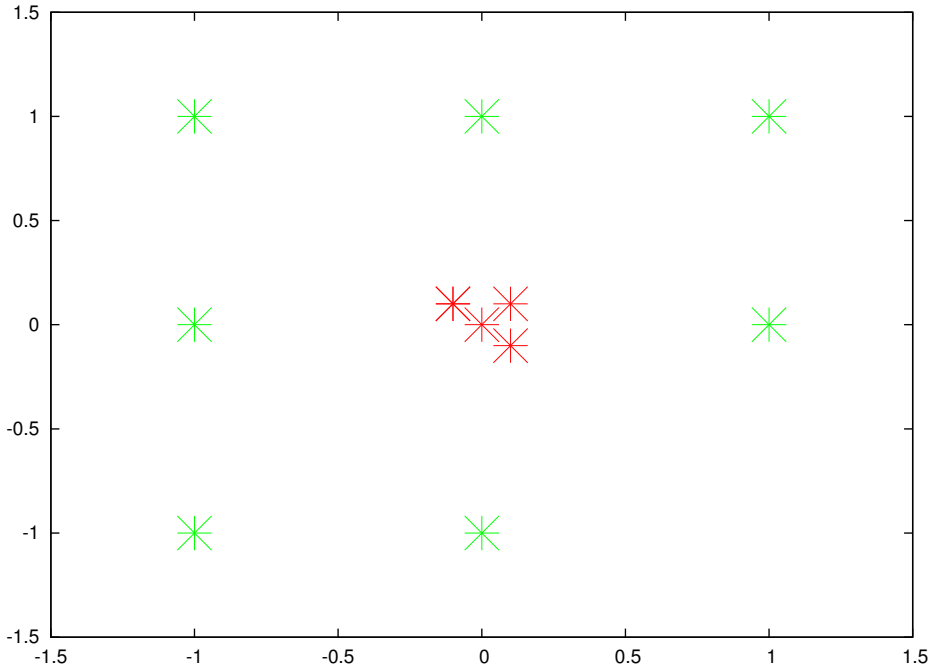
$$= x_1^2\, y_1^2 + x_2^2\, y_2^2 + 2\, x_1\, y_1\, x_2\, y_2 + 2\, x_1\, y_1\, c + 2\, x_2\, y_2\, c + c^2$$

$$= \begin{bmatrix} x_1^2 & x_2^2 & \sqrt{2}\, x_1\, x_2 & \sqrt{2c}\, x_1 & \sqrt{2c}\, x_2 & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1^2 \\ y_2^2 \\ \sqrt{2}\, y_1\, y_2 \\ \sqrt{2c}\, y_1 \\ \sqrt{2c}\, y_2 \\ c \end{bmatrix}$$

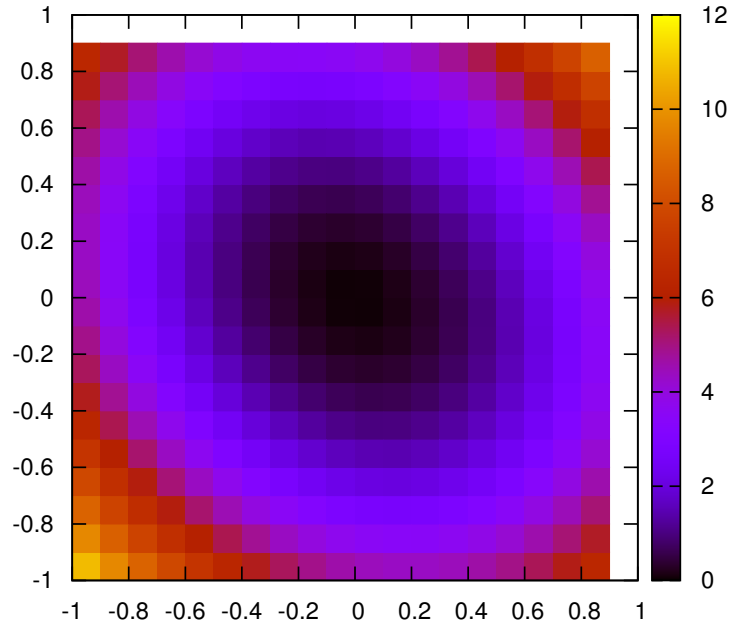
$$= \Phi(\mathbf{x}) \cdot \Phi(\mathbf{y})$$

Kernel polinomial

Conjunto de entrenamiento



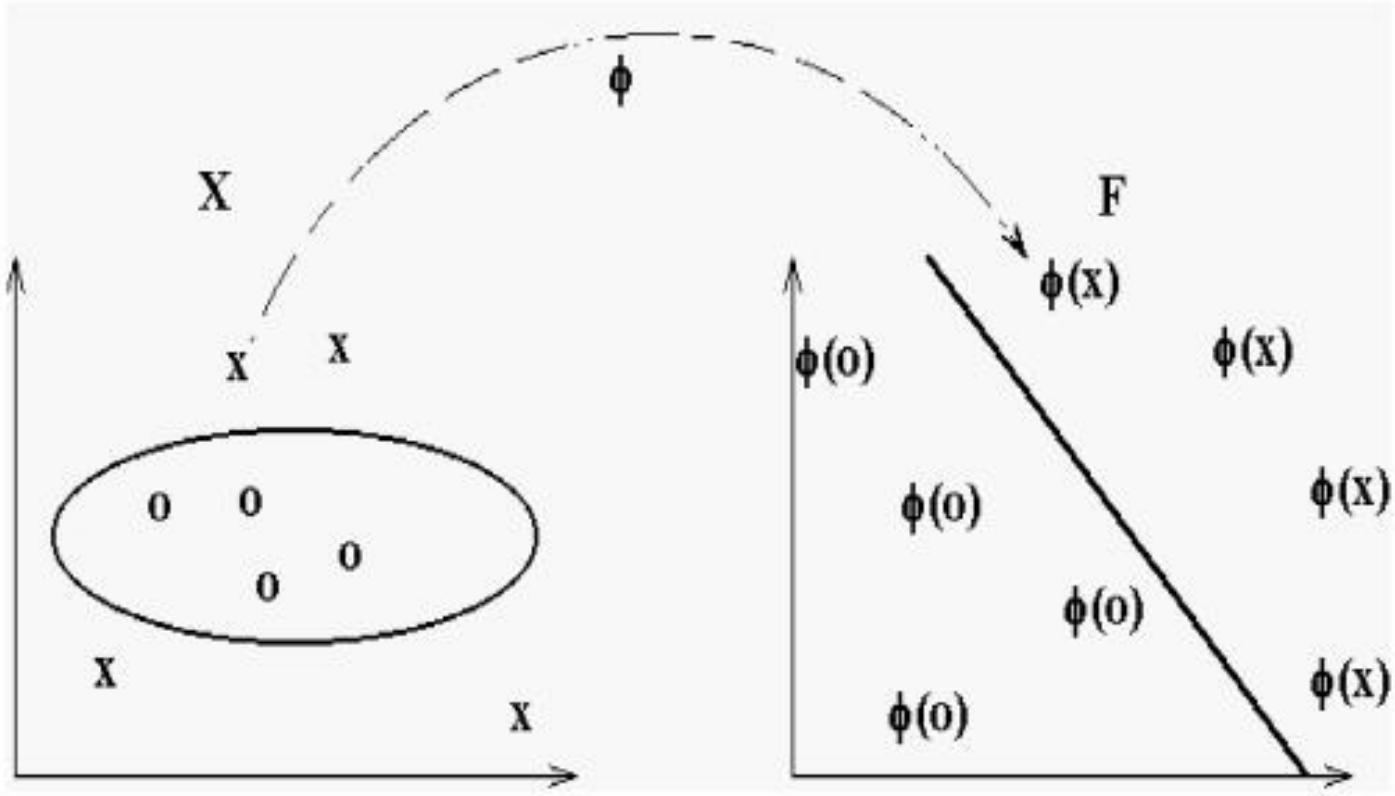
Representación de $g(\mathbf{x})$ con $\mathbf{x} \in [-1, 1]$ y $\alpha_n = 1, \forall n$



Recordad $g(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \, c_n \, K(\mathbf{x}_n, \mathbf{x})$ siendo $K(\mathbf{x}_n, \mathbf{x})$ un kernel polinómico

Kernel polinomial

En el ejemplo previo hay una proyección implícita a un nuevo espacio donde las muestras de entrenamiento son linealmente separables:



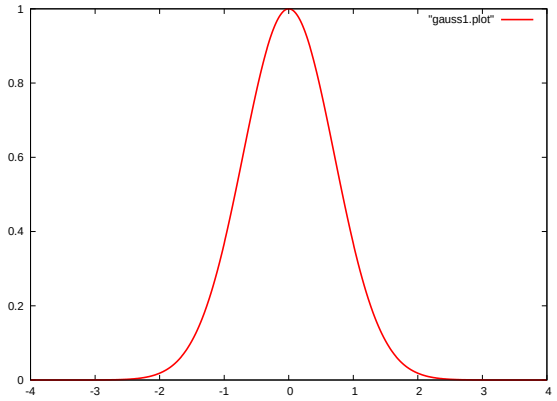
http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/b/b1/Svm_8_polinomial.JPG

Kernel gaussiano

Kernel Gaussiano:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \exp\left(\frac{- \mid\mid \mathbf{x} - \mathbf{y} \mid\mid^2}{2\sigma^2}\right)$$

Representación gráfica de la gaussiana (unidimensional):



Kernel muy empleado, pues asume que la función $\Phi(\cdot)$ implícitamente relacionada proyecta los puntos a un espacio de dimensionalidad infinita

En dimensionalidad infinita los datos son ***siempre*** linealmente separables

Índice

Kernels generalizados

Objetivo: definir y evaluar diferentes funciones kernel

La función kernel debe cumplir que:

$$\exists \Phi : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}^{D'} : K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \Phi(\mathbf{x}^t)\, \Phi(\mathbf{y})$$

- Mercer condition: condición necesaria y suficiente para caracterizar que K sea un kernel válido:

  "La matriz Gramm $\mathbf{K}_{i,j}$ definida para el conjunto de entrenamiento $\{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N\}$ es semidefinida positiva $(\mathbf{z}^t \mathbf{K} \mathbf{z} \geq 0, \forall \mathbf{z} \in \mathbb{R}^{N \times 1}, \mathbf{z} \neq \mathbf{0})$"
- La matriz Gramm $\mathbf{K}$ es semidefinida positiva si se cumple:

$$\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)\, z_i\, z_j \geq 0 \quad \forall z_i, z_j \in \mathbb{R} - \{0\}$$

Usando esta propiedad podemos construir kernels desde kernels más simples

Kernels generalizados

Si K_1 y K_2 son kernels, entonces K es un kernel:

$$K(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \begin{cases} c \cdot K_1(\mathbf{x},\mathbf{y}) & c > 0 \\ f(\mathbf{x}) \cdot K_1(\mathbf{x},\mathbf{y}) \cdot f(\mathbf{y}) & \text{para cualquier función } f \\ q(K_1(\mathbf{x},\mathbf{y})) & q \text{ polinomio con coeficientes no negativos} \\ (c + K_1(\mathbf{x},\mathbf{y}))^d & d, c > 0 \\ K_1(\mathbf{x},\mathbf{y}) + K_2(\mathbf{x},\mathbf{y}) & \\ K_1(\mathbf{x},\mathbf{y}) \cdot K_2(\mathbf{x},\mathbf{y}) & \\ \exp\left(K_1(\mathbf{x},\mathbf{y})\right) & \\ \frac{K_1(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\sqrt{K_2(\mathbf{x},\mathbf{y})}} & \end{cases}$$

Kernels generalizados

Sea $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{D \times D}$ una matriz semidefinida positiva, entonces K es un kernel:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{x}^t \, \mathcal{A} \, \mathbf{y}$$

Sean $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^D$, tales que $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_b)$, $\mathbf{y} = (\mathbf{y}_a, \mathbf{y}_b)$, con:

- $\mathbf{x}_a, \mathbf{y}_a \in \mathbb{R}^{D_a}$
- $\mathbf{x}_b, \mathbf{y}_b \in \mathbb{R}^{D_b}$
- $D = D_a + D_b$

Si K_a y K_b son kernels en $\mathbb{R}^{D_a}$ y $\mathbb{R}^{D_b}$, respectivamente, K es un kernel:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \begin{cases} K_a(\mathbf{x}_a, \mathbf{y}_a) + K_b(\mathbf{x}_b, \mathbf{y}_b) \\ K_a(\mathbf{x}_a, \mathbf{y}_a) \cdot K_b(\mathbf{x}_b, \mathbf{y}_b) \end{cases}$$

Índice

Introducción a LDA

LDA: Linear Discriminant Analysis

- Técnica de reducción de dimensionalidad *supervisada*
- Se pretende que la proyección lineal:
  - Preserve la separación de las clases del espacio original
  - Que los puntos de una misma clase permanezcan cercanos entre ellos
- Estas dos propiedades se resumen en dos estadísticos:
  - La separación de las medias de las clases
  - La reducción de las covarianzas intra-clase
- Se basa en ***vectores propios generalizados*** ($A^t\mathbf{x} = \lambda B^t\mathbf{x}$)

Conceptos previos

Vectores propios generalizados:

- Definición: dadas dos matrices A y B encontrar aquellos vectores y escalares que son solución de la siguiente expresión:

$$A^t\mathbf{x} = \lambda B^t\mathbf{x}$$

- Los posibles valores propios deben de satisfacer la ecuación:

$$\det(A^t - \lambda B^t) = 0$$

- El problema original se podría reescribir como un problema de vectores propios usual:

$$\left(B^t\right)^{-1} A^t\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

- En la práctica, por estabilidad numérica, se resuelve el problema de vectores propios generalizados en lugar de invertir la matriz B^t

Conceptos previos

Recordemos que $\mathbf{x}' = W^t\mathbf{x}$, donde $W \in \mathbb{R}^{D\times k}$

Bajo este supuesto tenemos:

- $\overline{\mathbf{x}}' = W^t\overline{\mathbf{x}}$ (media de los puntos proyectados)
- $\Sigma'_{\mathcal{X}} = W^t\Sigma_{\mathcal{X}}W$ (matriz de covarianzas de los puntos proyectados)

Por lo tanto:

- La media de los puntos en el espacio proyectado es la proyección de la media de los puntos en el espacio original
- La matriz de covarianza en el espacio proyectado es la proyección (dos veces) de la matriz de covarianzas de los puntos en el espacio original

LDA

Definiciones:

- Conjunto de muestras etiquetadas: $\mathcal{X} = \{(\mathbf{x}_1, c_1), (\mathbf{x}_2, c_2) \cdots, (\mathbf{x}_N, c_N)\}$
- Conjunto de clases: $\mathbb{C} = \{1, 2, \ldots, C\}$, $c_n \in \mathbb{C}$
- Media total: $\overline{\mathbf{x}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \mathbf{x}_n$
- Número de muestras de la clase c: N_c
- Media de clase c: $\overline{\mathbf{x}}_c = \frac{1}{N_c} \sum_{n:c_n=c}^{N} \mathbf{x}_n$
- Matriz de covarianzas de clase c: $\Sigma_c = \frac{1}{N_c} \sum_{n:c_n=c}^{N} (\mathbf{x}_n - \overline{\mathbf{x}}_c)(\mathbf{x}_n - \overline{\mathbf{x}}_c)^t$

LDA propone encontrar una matriz de proyección W que separe las medias $\overline{\mathbf{x}}_c$ pero reduzca las matrices de covarianzas Σ_c

LDA

Se proponen dos tipos de matrices relacionadas con el anterior objetivo:

- La matriz *entre-clases*[1]:

$$S_b = \sum_{c=1}^{C} N_c \, (\overline{\mathbf{x}}_c - \overline{\mathbf{x}})(\overline{\mathbf{x}}_c - \overline{\mathbf{x}})^t$$

- La matriz *intra-clases*[2]:

$$S_w = \sum_{c=1}^{C} \Sigma_c$$

Una buena proyección lineal debería conseguir en el espacio proyectado:

- S_b grande, y
- S_w pequeño

[1] between-class
[2] within-class

LDA

En el espacio proyectado ambas matrices, S_b y S_w se pueden calcular como:

$$S'_b = W^t S_b W \qquad\qquad S'_w = W^t S_w W$$

Suponiendo W ortonormal, S'_b y S'_w son matrices diagonales, donde cada elemento es la varianza en la dimensión a la que se proyecta

Varianza total: operador traza Tr (suma de elementos de la diagonal)

Buscamos una proyección lineal W que:

- Maximice la varianza entre-clase $Tr(S'_b)$, y
- Minimice la varianza intra-clase $Tr(S'_w)$

Se puede demostrar que es equivalente a la siguiente función objetivo:[3]

$$\widehat{W} = \underset{W}{\text{argmax}} \frac{Tr(W^t S_b W)}{Tr(W^t S_w W)}$$

[3] K. Fukunaga, "Statistical Pattern Recognition", pp. 446-447

Problema de optimización

Por simplicidad, optimizaremos la proyección a una única dimensión

$$\widehat{\mathbf{w}} = \underset{\mathbf{w}}{\text{argmax}} \frac{\mathbf{w}^t S_b \mathbf{w}}{\mathbf{w}^t S_w \mathbf{w}}$$

Dado que la función objetivo es invariante al escalado de $\mathbf{w}$, simplificaremos el problema de optimización condicionándolo a que $\mathbf{w}^t S_w \mathbf{w} = 1$

$$\widehat{\mathbf{w}} = \underset{\mathbf{w}}{\text{argmax}}\, \mathbf{w}^t S_b \mathbf{w} \quad \text{sujeto a} \quad \mathbf{w}^t S_w \mathbf{w} = 1$$

Expresado con el multiplicador de Lagrange correspondiente

$$\widehat{\mathbf{w}} = \underset{\mathbf{w}}{\text{argmax}}\, \underset{\lambda}{\text{máx}}\ \mathbf{w}^t S_b \mathbf{w} + \lambda(1 - \mathbf{w}^t S_w \mathbf{w})$$

Tras derivar respecto de $\mathbf{w}$ y λ e igualar a cero, obtenemos

$$S_b \mathbf{w} = \lambda S_w \mathbf{w}$$

donde $\mathbf{w}$ es el vector propio generalizado de S_b y S_w de mayor valor propio

Problema de optimización

En el caso general se busca la matriz de proyección W:

$$\widehat{W} = \underset{W}{\text{argmax}}\ Tr(W^t S_b W) \quad \text{sujeto a} \quad \mathbf{w}_j^t S_w \mathbf{w}_j = 1 \quad \forall j$$

que se puede expresar mediante un sumatorio de multiplicadores de Lagrange:

$$\widehat{W} = \underset{W}{\text{argmax}}\, \underset{\Lambda}{\text{máx}}\ Tr(W^t S_b W) + Tr(\Lambda \cdot (I - W^t S_w W))$$

donde Λ es una matriz diagonal con los multiplicadores de Lagrange en la diagonal, uno por cada vector de proyección, e I es la matriz identidad

Derivando con respecto a W y Λ e igualando a 0 nos queda:

$$S_b W = \Lambda S_w W$$

donde W son los vectores propios *generalizados* de S_b y S_w

Problema de optimización

Los vectores propios que maximizan la función objetivo original son aquellos con mayor valor propio asociado

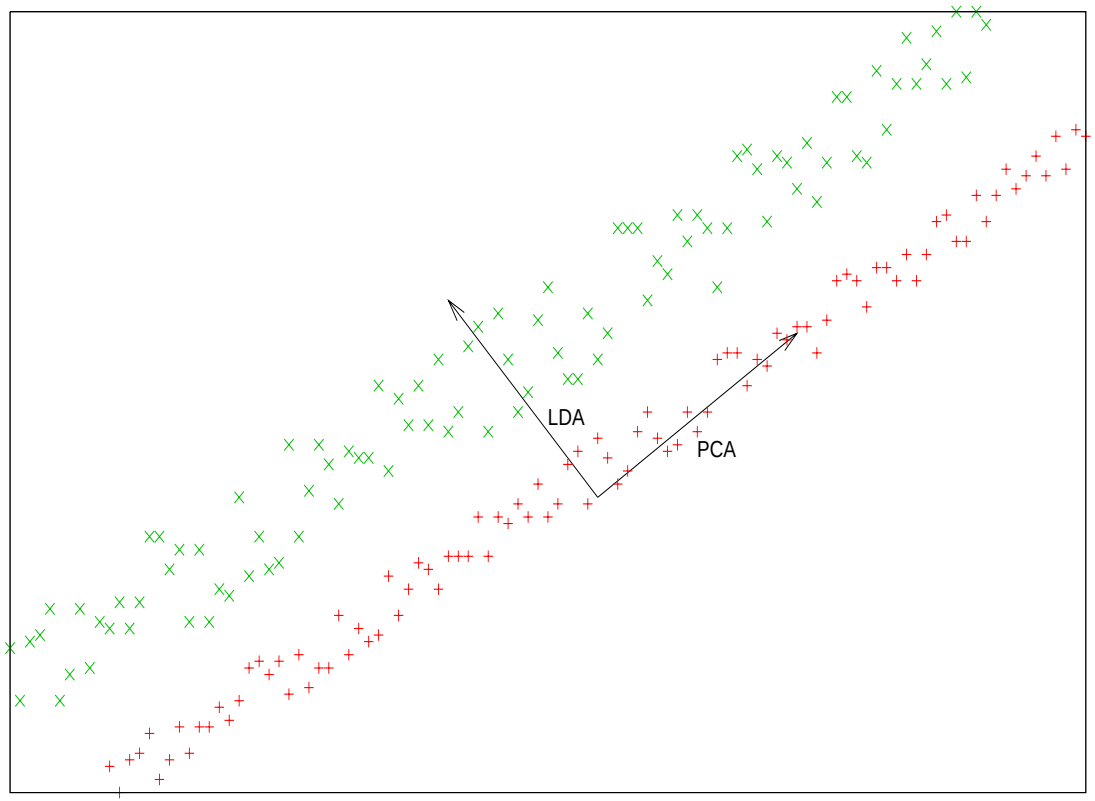
$$W_{D\times k} = \begin{pmatrix} \mathbf{w}_1 & \mathbf{w}_2 & \dots & \mathbf{w}_k \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_k$$

La configuración de la matriz S_b hace que ***no tengan más de*** $C-1$ ***vectores propios linealmente independientes***

Por ello no tiene sentido proyectar a una dimensionalidad $k > C-1$

Problema de optimización

LDA vs. PCA



Algoritmo LDA

- Entrada: N,D,k,$\mathcal{X} = \{(\mathbf{x}_1, c_1), (\mathbf{x}_2, c_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, c_N)\}$
- Salida: W
- Algoritmo:
  1. Calcular la media de los datos: $\overline{\mathbf{x}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \mathbf{x}_n$
  2. Calcular la media por clase: $\overline{\mathbf{x}}_c = \frac{1}{N_c} \sum_{n:c_n=c}^{N} \mathbf{x}_n$
  3. Calcular la matriz de covarianzas de clase: $\Sigma_c = \frac{1}{N_c} \sum_{n:c_n=c}^{N} (\mathbf{x}_n - \overline{\mathbf{x}}_c)(\mathbf{x}_n - \overline{\mathbf{x}}_c)^t$
  4. Calcular $S_w = \sum_{c=1}^{C} \Sigma_c$
  5. Calcular $S_b = \sum_{c=1}^{C} N_c (\overline{\mathbf{x}}_c - \overline{\mathbf{x}})(\overline{\mathbf{x}}_c - \overline{\mathbf{x}})^t$
  6. Encontrar vectores propios generalizados de S_b y S_w
  7. Ordenarlos según los valores propios asociados
  8. Definir W como la matriz con los k primeros vectores propios

Consideraciones prácticas

La inversión de la matriz S_w y la solución del problema de vectores propios generalizados pueden acarrear problemas numéricos

- Habitual si $D \gg n$ (D dimensión espacio original, n número de muestras)
- En estos casos la aplicación *directa* de LDA no es aconsejable

En este caso, para hacer una proyección lineal discriminativa se aconseja:

- Realizar una primera reducción de dimensionalidad mediante PCA
- Realizar una segunda reducción de dimensionalidad mediante LDA

La proyección quedaría como:

$$\mathbf{x}' = V^t W^t (\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}})$$

- W: matriz de proyección PCA
- V: matriz de proyección LDA