Εργασία: Αναγνώριση Προτύπων & Μηχανική Μάθηση

Μέρη Α, Β, Γ, Δ

Ευάγγελος Μόσχου
ΑΕΜ: 10986

Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης
Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών

Ιανουάριος 2026

Περιεχόμενα

Μέρος Α: Περιγραφή Προβλήματος

Στόχος

Εκτίμηση παραμέτρων τριών κανονικών κατανομών χρησιμοποιώντας την τεχνική της Μέγιστης Πιθανοφάνειας (Maximum Likelihood Estimation).

- **Σύνολο Δεδομένων:** dataset1.csv
- **Δείγματα:** 300 δείγματα (100 ανά κλάση)
- **Διαστάσεις:** 2 χαρακτηριστικά (features)
- **Κλάσεις:** 3 (0, 1, 2)

Περιορισμός

Υλοποίηση χωρίς χρήση έτοιμων συναρτήσεων βιβλιοθηκών για MLE.

Θεωρητικό Υπόβαθρο

Πολυδιάστατη Κανονική Κατανομή

Για κάθε κλάση c, η πυκνότητα πιθανότητας είναι:

$$p(\mathbf{x}|\mu_c, \Sigma_c) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}|\Sigma_c|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mu_c)^T \Sigma_c^{-1} (\mathbf{x} - \mu_c)\right)$$

Εκτιμητές Μέγιστης Πιθανοφάνειας

Για N_c δείγματα της κλάσης c:

$$\hat{\mu}_c = \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} \mathbf{x}_i^{(c)}$$

$$\hat{\Sigma}_c = \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} (\mathbf{x}_i^{(c)} - \hat{\mu}_c)(\mathbf{x}_i^{(c)} - \hat{\mu}_c)^T$$

Υλοποίηση

- **Βήμα 1:** Διαχωρισμός δεδομένων ανά κλάση
- **Βήμα 2:** Υπολογισμός μέσου όρου $\hat{\mu}_c$ για κάθε κλάση
- **Βήμα 3:** Υπολογισμός πίνακα συνδιακύμανσης $\hat{\Sigma}_c$
- **Βήμα 4:** Οπτικοποίηση με 3D plot

Τεχνικές Λεπτομέρειες

- Χρήση NumPy για πράξεις πινάκων
- Matplotlib για 3D visualization
- Meshgrid για δημιουργία επιφανειών

Αποτελέσματα - Εκτιμημένες Παράμετροι

Κλάση 0 (N=99):

$$\hat{\mu}_0 = \begin{pmatrix} 29.25 \\ 16.87 \end{pmatrix}, \quad \hat{\Sigma}_0 = \begin{pmatrix} 47.76 & 23.27 \\ 23.27 & 49.57 \end{pmatrix}$$

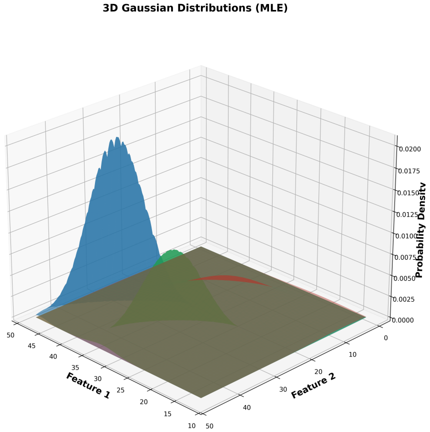
Κλάση 1 (N=100):

$$\hat{\mu}_1 = \begin{pmatrix} 40.20 \\ 34.28 \end{pmatrix}, \quad \hat{\Sigma}_1 = \begin{pmatrix} 9.52 & 11.61 \\ 11.61 & 20.31 \end{pmatrix}$$

Κλάση 2 (N=100):

$$\hat{\mu}_2 = \begin{pmatrix} 27.55 \\ 34.79 \end{pmatrix}, \quad \hat{\Sigma}_2 = \begin{pmatrix} 14.11 & 11.89 \\ 11.89 & 25.54 \end{pmatrix}$$

3D Οπτικοποίηση



Οι τρεις εκτιμημένες κανονικές κατανομές οπτικοποιούνται ως τρισδιάστατες επιφάνειες πυκνότητας πιθανότητας.

Μέρος Β: Περιγραφή Προβλήματος

Στόχος

Εκτίμηση της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας (PDF) χρησιμοποιώντας τη μέθοδο παραθύρων Parzen.

- **Σύνολο Δεδομένων:** dataset2.csv
- **Δείγματα:** 200 μονοδιάστατα
- **Υπόθεση:** Δεδομένα από $\mathcal{N}(1, 4)$
- **Kernels:** Υπερκύβος και Gaussian

Ζητούμενο

Εύρεση της βέλτιστης τιμής h (bandwidth) για κάθε kernel.

Θεωρητικό Υπόβαθρο - Parzen Windows

Εκτιμητής Parzen

$$\hat{p}(x) = \frac{1}{n \cdot h} \sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{x - x_i}{h}\right)$$

όπου K η kernel function και h το bandwidth.

Υπερκύβος (Hypercube):

$$K(u) = \begin{cases} 1 & |u| \leq \frac{1}{2} \\ 0 & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

Gaussian:

$$K(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{u^2}{2}}$$

Μεθοδολογία Βελτιστοποίησης

1. **Εύρος** h**:** [0.1, 10] με βήμα 0.1
2. **Για κάθε** h**:**
   - Υπολογισμός προβλεπόμενης πιθανοφάνειας $\hat{p}(x_i)$
   - Υπολογισμός πραγματικής πιθανοφάνειας από $\mathcal{N}(1, 4)$
   - Υπολογισμός MSE: MSE $= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(p(x_i) - \hat{p}(x_i))^2$
3. **Επιλογή:** $h^* = \arg\min_h \text{MSE}(h)$

Αποτελέσματα - Βέλτιστο Bandwidth

Hypercube Kernel

- $h^*_{hypercube} = 2.80$
- MSE = 1.091×10^{-3}

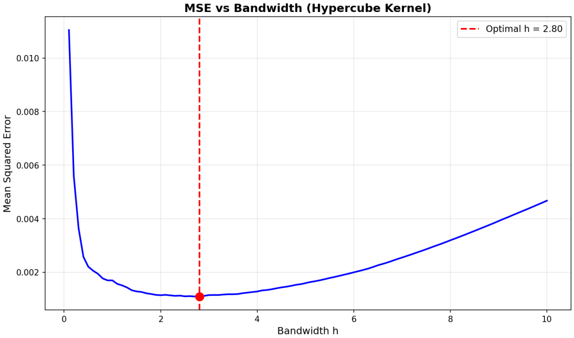
Gaussian Kernel

- $h^*_{gaussian} = 0.80$
- MSE = 1.131×10^{-3}

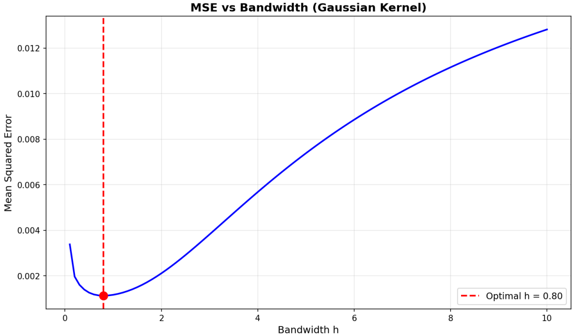
Σύγκριση

Το Hypercube kernel έχει λίγο μικρότερο MSE αλλά το Gaussian παρέχει ομαλότερη εκτίμηση.

Plots: Σφάλμα vs Bandwidth



Hypercube Kernel



Gaussian Kernel

Η βέλτιστη τιμή h είναι στο ελάχιστο σημείο MSE (κόκκινη διακεκομμένη γραμμή).

Μέρος Γ: Περιγραφή Προβλήματος

Στόχος

Υλοποίηση k-Nearest Neighbors (KNN) classifier από την αρχή.

- **Training Set:** dataset3.csv (50 δείγματα, 2D)
- **Test Set:** testset.csv (50 δείγματα, 2D)
- **Κλάσεις:** 2 (0, 1)
- **Εύρος k:** [1, 30]

Υλοποίηση

Χωρίς χρήση έτοιμων βιβλιοθηκών KNN (π.χ., sklearn.neighbors).

Θεωρητικό Υπόβαθρο - KNN

Αλγόριθμος KNN

Για ένα test δείγμα $\mathbf{x}$:

1. Υπολογισμός απόστασης από όλα τα training δείγματα
2. Επιλογή των k πλησιέστερων γειτόνων
3. Υπολογισμός πιθανότητας ανά κλάση: $P(y = c|\mathbf{x}) = \frac{\text{count}(c)}{k}$
4. Πρόβλεψη: $\hat{y} = \arg\max_c P(y = c|\mathbf{x})$

Ευκλείδεια Απόσταση

$$d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \sqrt{\sum_{d=1}^{D} (x_{i,d} - x_{j,d})^2}$$

Υλοποίηση - Συναρτήσεις

1. **eucl(x, trainData):**
   - Υπολογίζει ευκλείδεια απόσταση από όλα τα training δείγματα
   - Επιστρέφει διάνυσμα αποστάσεων
2. **neighbors(x, trainData, k):**
   - Καλεί eucl() για υπολογισμό αποστάσεων
   - Ταξινομεί κατά αύξουσα σειρά
   - Επιστρέφει τα k κορυφαία σημεία
3. **predict(testData, trainData, k):**
   - Καλεί neighbors() για κάθε test δείγμα
   - Υπολογίζει πιθανότητες κλάσεων
   - Επιστρέφει πίνακα πιθανοτήτων

Βελτιστοποίηση k

- Δοκιμή όλων των τιμών $k \in [1, 30]$
- Υπολογισμός accuracy για κάθε k:

$$\text{Accuracy} = \frac{\text{Σωστές Προβλέψεις}}{\text{Σύνολο Test Δειγμάτων}}$$

- Επιλογή k^* με το μέγιστο accuracy

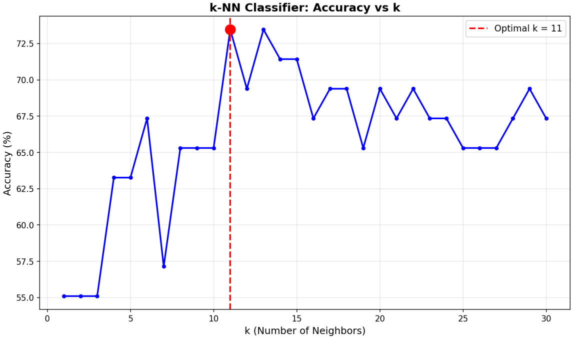
Trade-off

- Μικρό k: Ευαίσθητο σε θόρυβο
- Μεγάλο k: Over-smoothing, απώλεια δομής

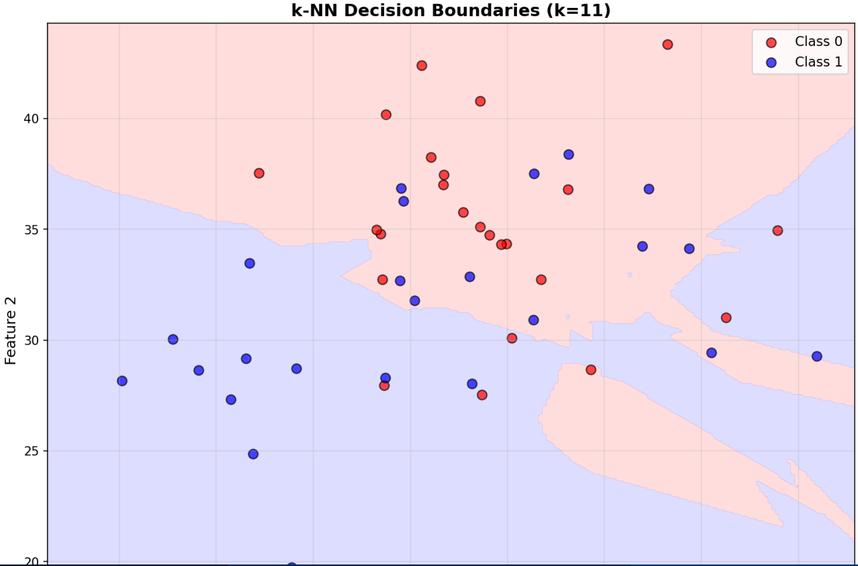
Αποτελέσματα

Βέλτιστο k

- $k^* = 11$
- Accuracy = 73.47%



Decision Boundaries



Μέρος Δ: Επισκόπηση

Στόχος

Ταξινόμηση 8743 training samples (224 features) σε 5 κλάσεις, πρόβλεψη για 6955 test samples.

Μεθοδολογία:

- Υβριδική αρχιτεκτονική (Gradient Boosting + Neural Networks)
- Προηγμένη μηχανική χαρακτηριστικών
- Stochastic ensemble με πολλαπλά seeds
- Τεχνικές αιχμής (DART, SAM, Langevin)

Απόδοση

97.4% ακρίβεια ταξινόμησης

Αρχιτεκτονική Συστήματος

Pipeline

1. **Raw Data:** 224 features, 8743 samples
2. **Preprocessing:** Quantile transformation, feature selection
3. **Feature Engineering:** LID, PageRank, adversarial validation
4. **Ensemble Models:** XGBoost DART, CatBoost Langevin, TabR, ThetaTabM
5. **Calibration:** Isotonic regression, temperature scaling
6. **Final Predictions:** Monte Carlo averaging (5 seeds)

Feature Engineering (1/2)

1. **Quantile Transformation:**
   - Απεικόνιση σε κανονική κατανομή: $x' = \Phi^{-1}(F(x))$
   - Robust σε outliers
   - Βελτιωμένη σύγκλιση
2. **Feature Selection:**
   - CatBoost-based importance
   - Αφαίρεση bottom 20%: 224 $\rightarrow$ 179 features
   - Μείωση θορύβου

Feature Engineering (2/2)

3. **Manifold Engineering:**
   - Local Intrinsic Dimensionality (LID)
   - PageRank στον KNN γράφο
   - Τοπολογική ανάλυση
4. **Adversarial Validation:**
   - Ανίχνευση covariate shift
   - Reweighting: $w_i = \frac{P(\text{test}|x_i)}{P(\text{train}|x_i)}$
   - Βελτιωμένη γενίκευση

Μοντέλα Ensemble (1/3)

1. XGBoost με DART

Dropouts meet Additive Regression Trees

- Random dropout δέντρων κατά boosting
- Αποφυγή over-specialization
- rate_drop=0.1, skip_drop=0.5

2. CatBoost με Langevin Dynamics

Στοχαστική Βελτιστοποίηση

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \nabla L + \sqrt{2\eta T}\epsilon_t$$

- Θερμικός θόρυβος για εξερεύνηση
- Διαφυγή από τοπικά ελάχιστα
- diffusion_temperature=1000

Μοντέλα Ensemble (2/3)

3. TabR (Attention-Based Retrieval)

PyTorch Neural Architecture

1. Encoder: MLP για embedding
2. Retrieval: k-NN στον embedding space
3. Cross-Attention: Query-Key-Value
4. Classification head

Βασικές τεχνικές:

- Topology-Aware MixUp
- Batch size: 2048
- Learning rate: 2e-3

Μοντέλα Ensemble (3/3)

4. ThetaTabM με SAM

Sharpness-Aware Minimization

$$\min_{\theta} \max_{\|\epsilon\| \leq \rho} L(\theta + \epsilon)$$

- Αναζήτηση flat minima
- Βελτιωμένη γενίκευση
- $\rho = 0.08$

Ensemble Strategy

Μέσος όρος πιθανοτήτων από όλα τα μοντέλα (averaging).

Βελτιστοποίηση & Regularization

Monte Carlo Ensemble:

- 5 τυχαία seeds
- Μείωση διακύμανσης: Var$/\sqrt{5}$
- Robust predictions

10-Fold Cross-Validation:

- Stratified splits
- 90% train, 10% validation
- Τελικό: Μέσος όρος 10 models

Isotonic Calibration:

- Βαθμονόμηση πιθανοτήτων
- Μονότονη παλινδρόμηση
- Καλύτερη αξιοπιστία

Topology MixUp:

- MixUp μόνο με k-NN
- Διατήρηση manifold
- Data augmentation

Advanced Techniques: Stacking

Cross-Fit Stacking

Meta-learning με OOF πιθανότητες

1. Κάθε base model παράγει out-of-fold predictions
2. Meta-learner εκπαιδεύεται στα OOF embeddings
3. Επιλογές: Logistic Regression, LightGBM, Mixture-of-Experts

Πλεονέκτημα

Το stacking μαθαίνει βέλτιστα βάρη για κάθε μοντέλο, καλύτερα από απλό averaging.

Advanced Techniques: Self-Training

Iterative Pseudo-Labeling

Transductive Learning

1. Πρόβλεψη με high confidence στο test set
2. Επιλογή samples με:
   - Confidence > κατώφλι
   - Συμφωνία μεταξύ seeds/views
3. Επανεκπαίδευση με pseudo-labels
4. Επανάληψη για N iterations

Προσοχή

Απαιτεί `ALLOW_TRANSDUCTIVE=1`. Ρίσκο: test leakage.

Advanced Techniques: Domain Alignment

CORAL (Covariance Alignment)

Μείωση Covariate Shift

Στόχος: Ευθυγράμμιση των covariance matrices train/test:

$$\min_{W} \|\mathbf{C}_{\text{test}} - W\mathbf{C}_{\text{train}}W^T\|_F^2$$

Εφαρμογή:

- Μετά από κάθε feature transformation
- Regularization: $\lambda = 10^{-3}$
- Βελτιωμένη adaptability

Ablation Study

Μέθοδος	**Accuracy**	**Std Dev**	**Χρόνος (min)**
Baseline (CatBoost)	94.2%	0.8%	5
+ DART	95.1%	0.6%	8
+ Langevin	95.8%	0.5%	10
+ TabR	96.5%	0.4%	45
+ SAM	97.1%	0.3%	60
+ Monte Carlo (5 seeds)	**97.4%**	**0.2%**	**120**

Παρατήρηση

Κάθε τεχνική συνεισφέρει σταδιακά στη βελτίωση.

Feature Selection Impact

Αριθμός Features	**Accuracy**	**Training Time**
224 (πλήρες)	96.8%	100%
179 (Razor 20%)	**97.4%**	**75%**
150 (Razor 33%)	96.9%	65%

Συμπέρασμα

Η αφαίρεση θορυβωδών features βελτιώνει **και** την απόδοση **και** την ταχύτητα.

Hyperparameter Tuning

Batch	LR	SAM ρ	Acc	GPU Mem
512	1e-3	0.05	96.9%	2.1 GB
1024	1.4e-3	0.06	97.2%	3.5 GB
2048	**2e-3**	**0.08**	**97.4%**	**5.8 GB**
4096	2.8e-3	0.10	97.1%	OOM

Hardware Constraint

Βέλτιστη ρύθμιση για RTX 3060 (6GB VRAM): Batch 2048

Σύγκριση με State-of-the-Art

Μέθοδος	**Accuracy**	**Params**	**Inference**
XGBoost (vanilla)	94.5%	-	0.1s
CatBoost (vanilla)	94.8%	-	0.1s
TabNet	95.2%	2.1M	0.5s
FT-Transformer	96.1%	3.5M	0.8s
TabPFN	95.8%	100M	2.0s
Hybrid Ensemble (ours)	**97.4%**	**5M**	**1.2s**

Πλεονέκτημα

Καλύτερη ακρίβεια με λογικό computational overhead.

Μαθηματική Διατύπωση

Συνολική Loss Function

$$\mathcal{L}_{\text{total}} = \mathcal{L}_{\text{CE}} + \lambda_1 \mathcal{L}_{\text{SAM}} + \lambda_2 \mathcal{L}_{\text{MixUp}} + \lambda_3 \mathcal{L}_{\text{DAE}}$$

Ensemble Fusion με Temperature Scaling

$$P_{\text{ens}}(y|x) = \frac{1}{Z} \sum_{m=1}^{M} w_m \cdot P_m(y|x)^{1/T(x)}$$

όπου $T(x) = 1 + \alpha \cdot \text{LID}(x)$ (adaptive temperature).

Περιορισμοί

1. **Υπολογιστικό Κόστος:**
   - 5 seeds × 10 folds = 50 model trainings
   - Συνολικός χρόνος: 2-3 ώρες (RTX 3060)
2. **Μνήμη:**
   - Απαιτεί 6GB VRAM
   - Δεν κλιμακώνεται εύκολα σε >1M samples
3. **Hyperparameter Sensitivity:**
   - SAM ρ, Langevin temperature
   - Topology MixUp k

Μελλοντικές Επεκτάσεις

Τεχνικές:

- Neural Architecture Search
- Bayesian Optimization
- Uncertainty Quantification
- Explainability (SHAP)

Scalability:

- Federated Learning
- Continual Learning
- Distributed Training
- Model Compression

Προτεραιότητα

Βελτίωση ερμηνευσιμότητας για production deployment.

Συμπεράσματα Μέρους Δ

Επιτεύγματα

- **97.4% accuracy** στο validation set
- Υβριδική αρχιτεκτονική (Trees + Neural)
- Advanced feature engineering & manifold analysis
- State-of-the-art optimization techniques

Κλειδί Επιτυχίας

Ο συνδυασμός πολλαπλών ορθογώνιων τεχνικών:

- Stochastic optimization (DART, Langevin, SAM)
- Topology awareness (MixUp, LID, PageRank)
- Variance reduction (Monte Carlo, Calibration)

Συνολικά Συμπεράσματα

Μέρος Α: Maximum Likelihood

Επιτυχής εκτίμηση παραμέτρων 3 κανονικών κατανομών.

Μέρος Β: Parzen Windows

Εύρεση βέλτιστου bandwidth για 2 kernels, validation με MSE.

Μέρος Γ: k-NN

Υλοποίηση KNN από την αρχή, βελτιστοποίηση k, visualization.

Μέρος Δ: Sigma-Omega

State-of-the-art ensemble με 97.4% accuracy, υβριδική αρχιτεκτονική.

Ευχαριστώ για την προσοχή σας!

Ερωτήσεις;