Classificazione

- Classificatore di Bayes
  - Approccio parametrico (distribuzione Multinormale)
  - Approccio non parametrico (Parzen Window)
- Nearest Neighbor
  - *k*-NN
  - Metriche
- SVM
  - Lineari: pattern linearmente separabili e non
  - Non lineari
  - Caso multiclasse
- Multi classificatori
  - Fusione a livello di decisione
  - Fusione a livello di confidenza
  - Random Forest (Bagging)
  - AdaBoost (Boosting), Gradient Boosting

Support Vector Machines (SVM)

La teoria che governa i meccanismi di funzionamento di SVM è stata introdotta da Vapnik a partire dal 1965 (statistical learning theory), e perfezionata più recentemente (1995) dallo stesso Vapnik e altri. SVM è uno degli strumenti più utilizzati per la classificazione di pattern.

Invece di stimare le densità di probabilità delle classi, Vapnik suggerisce di risolvere direttamente il problema di interesse (che considera più semplice), ovvero determinare le superfici decisionali tra le classi (classification boundaries).

decision

andiamo per gradi …

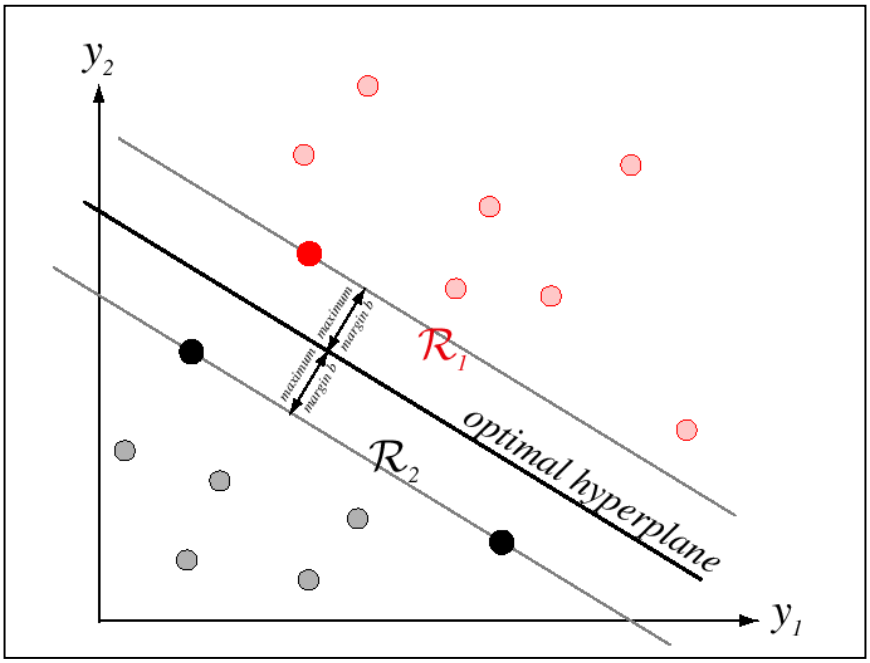
SVM nasce come classificatore binario (2 classi), estendibile a più classi. Affrontiamo la trattazione per gradi:

- SVM lineare (i.e., la superficie di separazione è un iperpiano) e pattern del training set linearmente separabili (i.e., esiste per ipotesi almeno un iperpiano in grado di separarli).
- SVM lineare e pattern non linearmente separabili. Ci saranno inevitabilmente errori di classificazione nel training set non esistendo alcun iperpiano in grado di separare i pattern.
- SVM non lineare (i.e., superficie di separazione complessa) senza ipotesi sulla separabilità dei pattern.
- Estensione multiclasse.

SVM: l'idea

Date due classi di pattern multidimensionali linearmente separabili, tra tutti i possibili iperpiani di separazione, SVM determina quello in grado di separare le classi con il maggior *margine* possibile.

Il margine è la distanza minima di punti delle due classi nel training set dall'iperpiano individuato. *Definizione formale in seguito.*



La massimizzazione del margine è legata alla generalizzazione. Se i pattern del training set sono classificati con ampio margine si può «sperare» che anche pattern del test set vicini al confine tra le classi siano gestiti correttamente.

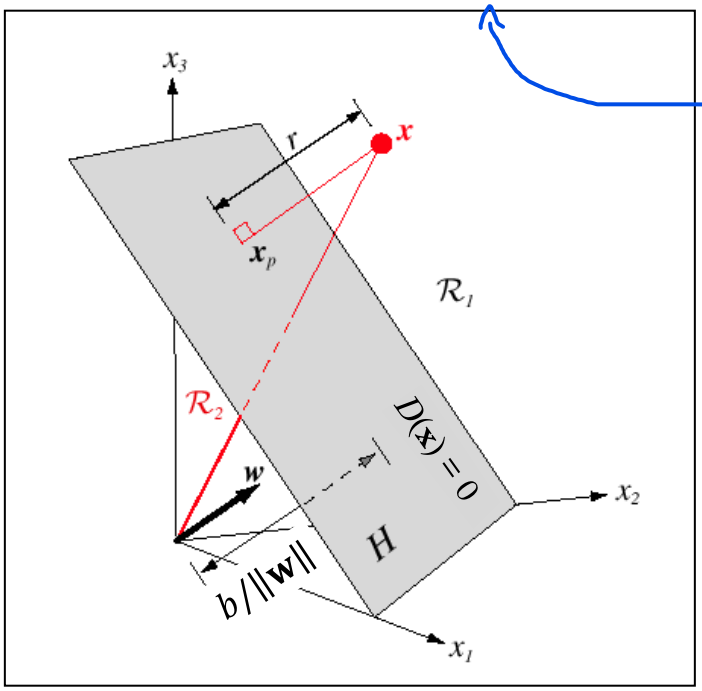
Come vedremo il problema può essere impostato come una ottimizzazione convessa (convex optimization). Come tale ammette un solo minimo globale (vantaggio: non si rischia di essere intrappolati in minimi locali).

ottimizzazione vincolata: separazione totale con margine piú alto (ottimizzazione quadratica)

SVM lineari: Pattern Separabili

Date due classi di pattern (linearmente separabili), e un training set TS contenente n campioni $(\mathbf{x}_1, y_1) \ldots (\mathbf{x}_n, y_n)$, dove $\mathbf{x}_i \in \Re^d$ sono i pattern multidimensionali e $y_i \in \{+1, -1\}$ le etichette delle due classi, esistono diversi iperpiani in grado di eseguire la separazione voluta.
Un generico iperpiano è definito dai parametri $(\mathbf{w}, b)$:

w puó essere con modulo non unitario (cioé |w|!=1)



Iperpiano

per semplicità omettiamo il trasposto nel prodotto scalare

é un prodotto vettore colonna per vettore riga

$$D(\mathbf{x}) = \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b$$

$\mathbf{w}$: vettore normale all'iperpiano

$b/\|\mathbf{w}\|$: distanza dall'origine dell'iperpiano

$D(\mathbf{x}) = 0$: luogo dei vettori sul piano

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_p + r\frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|}, \qquad D(\mathbf{x}_p) = \mathbf{0}$$

essendo su iperpiano vale 0

proiezione di x + nella direzione di w mi sposto di r, cosí ho x

proiezione di x su iperpiano

$$D(\mathbf{x}) = \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b = r \cdot \|\mathbf{w}\|$$

La distanza di un vettore $\mathbf{x}$ dall'iperpiano vale pertanto: $r = \frac{D(\mathbf{x})}{\|\mathbf{w}\|}$

Gli iperpiani $(\mathbf{w}, b)$ che separano i pattern del TS, con distanza minima $1/\|\mathbf{w}\|$ su ogni lato, soddisfano, per $i = 1 \ldots n$, le equazioni:

É >=+1 e <=-1 perché devo considerare il margine (tutti i punti delle due classi devono stare sopra e sotto il margine)

$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{x_i} + b \geq +1 \quad se \quad y_i = +1$$
$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{x_i} + b \leq -1 \quad se \quad y_i = -1$$

o in modo più compatto:

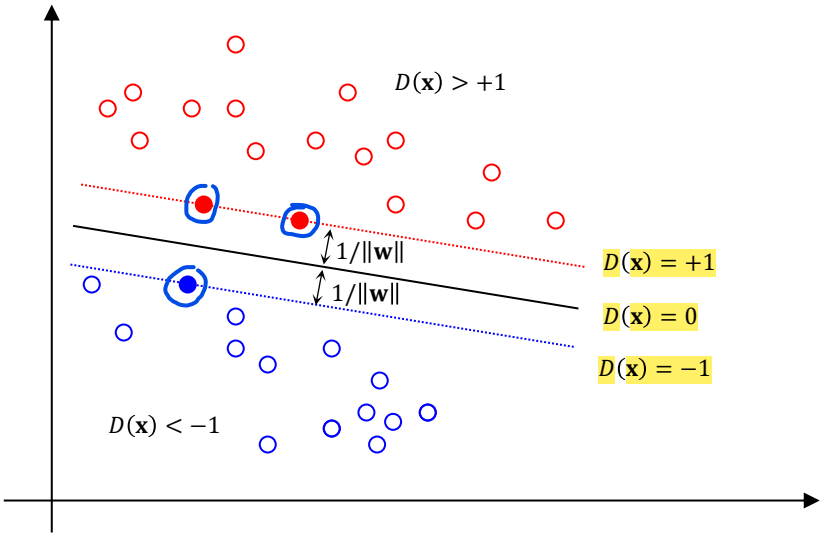
$$y_i[\mathbf{w} \cdot \mathbf{x_i} + b] \geq 1 \quad per \;\; i = 1 \ldots n$$

SVM lineari: Pattern Separabili (2)

La minima distanza tra l'iperpiano di separazione e un pattern del training set è detta *margine* (τ).

Il margine é la distanza dei support vectors dal decision boundary

I punti che mi interessano nella definizione del margine e decision boundary sono i support vectors



La distanza dei punti che giacciono sull'iperpiano $D(\mathbf{x}) = +1$ dall'iperpiano di separazione ($D(\mathbf{x}) = 0$) è $1/\|\mathbf{w}\|$; lo stesso vale per i punti sull'iperpiano $D(\mathbf{x}) = -1$.

Pertanto il margine è $\tau = 2/\|\mathbf{w}\|$.

che

L'iperpiano ottimo secondo SVM è quello soddisfa i vincoli di separazione dei pattern e massimizza il margine τ (o alternativamente minimizza il suo inverso):

Questi vincoli assicurano che ogni punto di addestramento (xi, yi) sia classificato correttamente e che si trovi ad una distanza minima (il margine) dall'iperpiano di separazione.

Minimizza: $\|\mathbf{w}\|^2/2$ Questo equivale a massimizzare il margine

Vincoli: $y_i[\mathbf{w} \cdot \mathbf{x_i} + b] - 1 \geq 0 \quad per \ i = 1 \ldots n$

I pattern del training set che giacciono sul margine (cerchi pieni in figura) sono detti *support vector*. Tali pattern, che costituiscono i casi più complessi, definiscono completamente la soluzione del problema, che può essere espressa come funzione di solo tali pattern, indipendentemente dalla dimensionalità dello spazio d e dal numero n di elementi in TS.

Gli alpha_i (moltiplicatori di Lagrange) pesano le penalizzazioni in caso di violazione dei vincoli (se rompo il vincolo, aumenta l'output della funzione obiettivo, ma la funzione deve essere minimizzata, quindi si tende a ridurre il numero di vincoli violati)

SVM lineari: Pattern Separabili (3)

Formalmente, le sommatorie nella funzione obiettivo duale e nella determinazione di w* e b* scorrono su tutti gli n punti di addestramento. Tuttavia, in pratica, queste sommatorie sono riconducibili solo ai Support Vectors.

Questo perché solo gli alpha_i dei SV sono diversi da zero

(chiamato problema primale)

Il problema di ottimizzazione precedente, può essere risolto passando innanzitutto a una 1 formulazione Lagrangiana e successivamente a una 2 formulazione duale.

1

La formulazione Lagrangiana prevede di introdurre un moltiplicatore α_i ($\alpha_i \geq 0$) per ogni vincolo nella forma $equazione \geq 0$ e di sottrarre il vincolo moltiplicato per α_i dalla funzione obiettivo:

n= numero di training point del TS

Funzione Obiettivo Primale

Vincolo per ogni training point

$$Q(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\mathbf{w} \cdot \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \left(y_i [\mathbf{w} \cdot \mathbf{x_i} + b] - 1\right)$$

vincolo primale

Questi moltiplicatori quantificano "quanto è importante" un vincolo.

da minimizzare rispetto a $\mathbf{w}$ e b e massimizzare rispetto a $\alpha_i \geq 0$.

2

Utilizzando le condizioni di Karush-Kuhn-Tucker (KKT), il problema può essere posto in forma duale esprimendo i parametri $\mathbf{w}$ e b in funzione dei moltiplicatori α_i. Si elimina così la dipendenza diretta da $\mathbf{w}$ e b e il problema può essere risolto massimizzando la nuova funzione obiettivo rispetto ai soli α_i:

1 Stazionarietà (Eliminazione di w e b) → Si impongono le derivate parziali della funzione Lagrangiana Q(w, b, alpha) rispetto alle variabili primali (w e b) pari a zero.

Sostituzione e 2 Formulazione Duale: si eliminano le variabili w e b, ottenendo la funzione Q(alpha) che dipende solo dai moltiplicatori alpha.

$$Q(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{i=1\ldots n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1\ldots n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \left(\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j\right)$$

prodotto scalare riga-colonna

$$\text{con vincoli} \quad \sum_{i=1\ldots n} y_i \alpha_i = 0 \quad \text{e} \quad \alpha_i \geq 0 \;\; per \; i = 1 \ldots n$$

Si noti inoltre che i pattern compaiono ora solo come prodotti scalari.

Per approfondimenti e derivazione delle equazioni:

- S. Gunn, *Support Vector Machines for Classification and Regression*
- C. Burges, *A Tutorial on Support Vector Machines for Pattern Recognition*
- http://web.mit.edu/6.034/wwwbob/svm-notes-long-08.pdf

SVM lineari: Pattern Separabili (4)

Il problema di ottimizzazione precedente può essere risolto attraverso un algoritmo di programmazione quadratica (disponibile in librerie numeriche).

La soluzione consiste nel derivare i valori ottimi $\alpha_1^*, \alpha_2^* \ldots \alpha_n^*$

Le condizioni KKT assicurano che $\alpha_i^* = 0$ per tutti i vettori che non sono support vector.

L'iperpiano ottimo è dunque parametrizzato da:

w* e b* sono i valori ottimi

$$\mathbf{w}^* = \sum_{i=1\ldots n} \alpha_i^* \, y_i \, \mathbf{x}_i$$

$$\text{e} \quad b^* = y_s - \sum_{i=1\ldots n} \alpha_i^* \, y_i (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_s)$$

dove $(\mathbf{x}_s, y_s)$ è uno dei support vector.

La funzione distanza dall'iperpiano è:

$$D(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^* \cdot \mathbf{x} + b^* = \sum_{i=1\ldots n} \alpha_i^* \, y_i (\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_i) + b^*$$

Si noti che:

- Il segno della funzione $D(\mathbf{x})$ consente di classificare un generico pattern $\mathbf{x}$. (risultato binario, cioé o classe 1 o classe 2)
- Le sommatorie sono riducibili ai soli support vector.
- Nel caso lineare non è necessario, dopo aver calcolato $\mathbf{w}^*$ e b^*, conservare/memorizzare i support vectors.

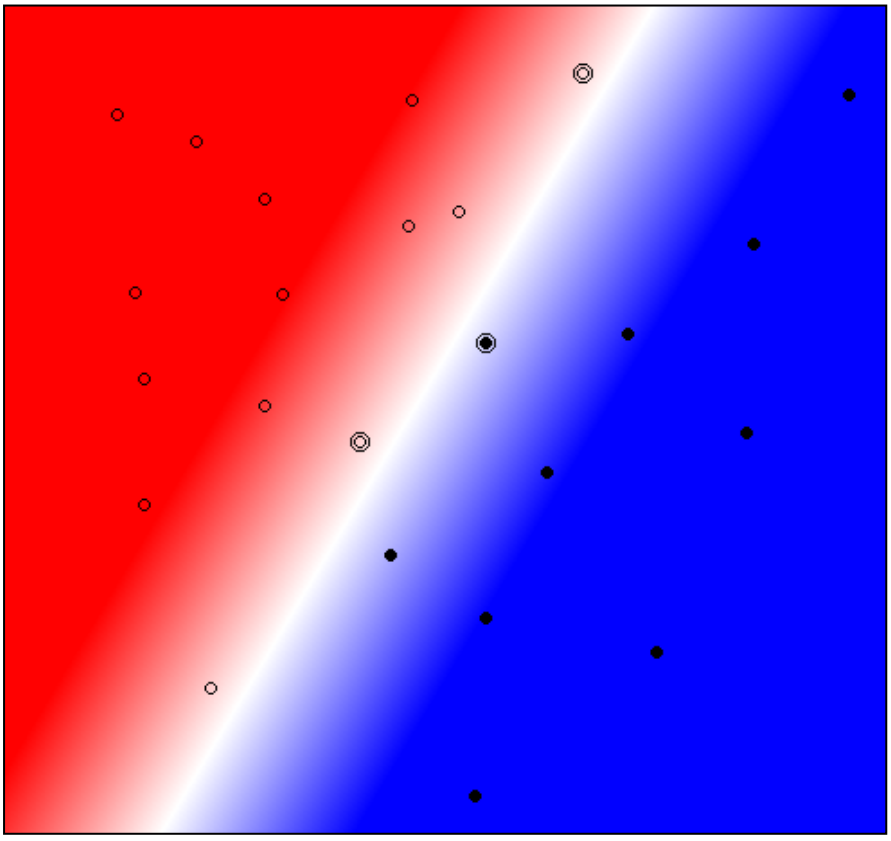
SVM lineari: Pattern Separabili (4)

Teoria dell'Apprendimento (Vapnik-Chervonenkis): La relazione (n_sv)/n (dove n è il numero totale di pattern in TS) non è casuale. Nella teoria statistica dell'apprendimento, si può dimostrare che l'errore atteso di generalizzazione (l'errore su dati mai visti) è limitato superiormente da una funzione della capacità del modello. Per le SVM, questa capacità (la dimensione VC) è direttamente correlata al numero di SV.

Vantaggi dell'approccio SVM:

- Definizione della soluzione sulla base di un numero ridotto di support vector (solitamente pochi).
  - Più è difficile separare le classi (cioè più i punti sono vicini al margine), maggiore sarà il numero di SV.
- Il numero di support vector n_{sv} indica la complessità del problema e può essere dimostrato che l'errore medio (sui possibili training set) è limitato da n_{sv}/n.
- SVM «scala» molto bene rispetto alla dimensionalità d dello spazio delle feature (grazie ai prodotti scalari). La complessità computazionale nel training è quadratica rispetto al numero n di pattern in TS. In pratica il problema può essere risolto per $d = 10^7$ e per n fino a 10^4.

"Curse of Dimensionality" Evitata: Molti algoritmi soffrono della CoD (l'aumento della complessità esponenziale con d). Le SVM, invece, ne sono in gran parte immuni, soprattutto quando si usa il Kernel Trick.



Esempio:
i support vectors (cerchiati) definiscono la soluzione.

SVM lineari: Pattern non Separabili

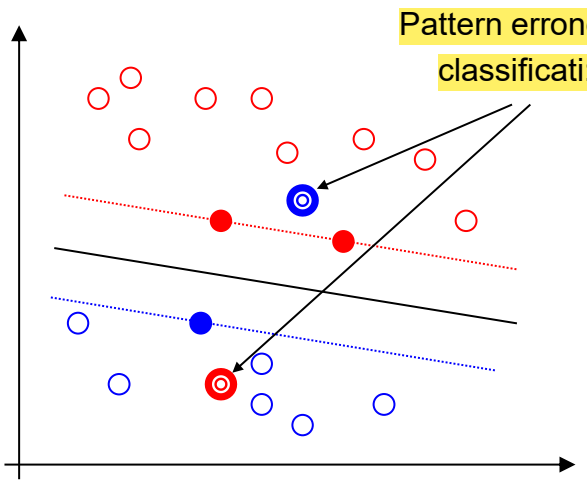
In questo caso non tutti i pattern possono essere separati da un iperpiano, ed è necessario rilassare i vincoli di separazione, per far sì che alcuni pattern (il minor numero possibile) possano valicare il confine della classe.

A tal fine si introducono n variabili di *slack* positive $\xi_i,\ i = 1 \ldots n$ e si modificano i vincoli di separazione:

$$y_i[\mathbf{w} \cdot \mathbf{x_i} + b] \geq 1 - \xi_i \quad per\ \ i = 1 \ldots n$$

Per ogni pattern $\mathbf{x}_i$ del TS, la variabile ξ_i codifica la deviazione dal margine. Per i pattern separabili del TS le corrispondenti variabili di slack assumeranno valore 0.

Con le variabili slack, posso "bypassare" il vincolo riguardante alla correttezza della classificazione di tutti i punti del TS



L'iperpiano ottimo deve in questo caso ancora massimizzare il margine, ma allo stesso tempo minimizzare il numero di elementi non correttamente classificati. La funzione obiettivo, e di conseguenza il problema di ottimizzazione vengono così modificati:

parametro di regolarizzazione del numero di elementi erroneamente classificati

Minimizza: $\frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2} + C \sum_{i=1\ldots n} \xi_i$

importanza relativa del rispetto dei vincoli in confronto al margine

Vincoli: $y_i[\mathbf{w} \cdot \mathbf{x_i} + b] \geq 1 - \xi_i \quad per\ \ i = 1 \ldots n$

SVM lineari: Pattern non Separabili (2)

Il coefficiente C nel problema di ottimizzazione precedente, indica l'importanza relativa degli errori di classificazione rispetto all'ampiezza del margine. Si tratta di uno dei pochi iperparametri che l'utente deve scegliere per il tuning di SVM.

Passando attraverso forma lagrangiana/duale otteniamo un risultato uguale al caso linearmente separabile, tranne che per l'introduzione del limite superiore (C) per i valori dei moltiplicatori α_i :

$$Q(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{i=1\ldots n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1\ldots n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j)$$

vengono limitati in magnitudine

$$\text{con vincoli} \sum_{i=1\ldots n} y_i \alpha_i = 0 \quad \text{e} \quad 0 \leq \alpha_i \leq C \quad per\ i = 1 \ldots n$$

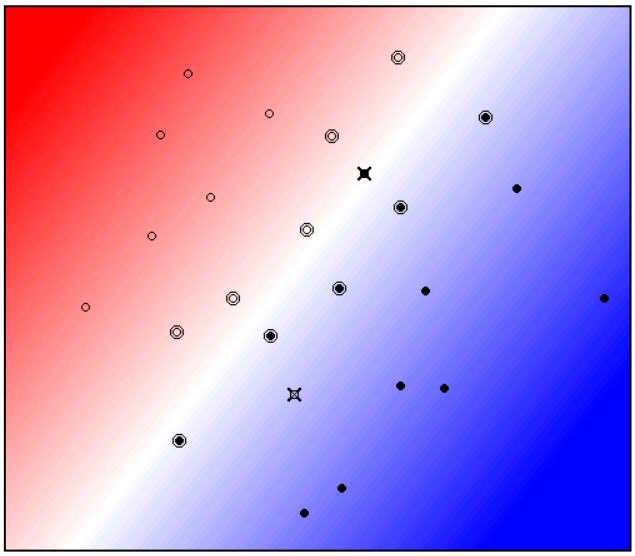
Le variabili slack durante le trasformazioni (forma lagrangiana/duale) vengono perse e si aggiunge il vincolo di C

Il metodo di soluzione (i.e. Progr. Quadratica) e il modo di derivare l'iperpiano dagli α_i sono gli stessi del caso linearmente separabile.

Esempi:

$C = 10$

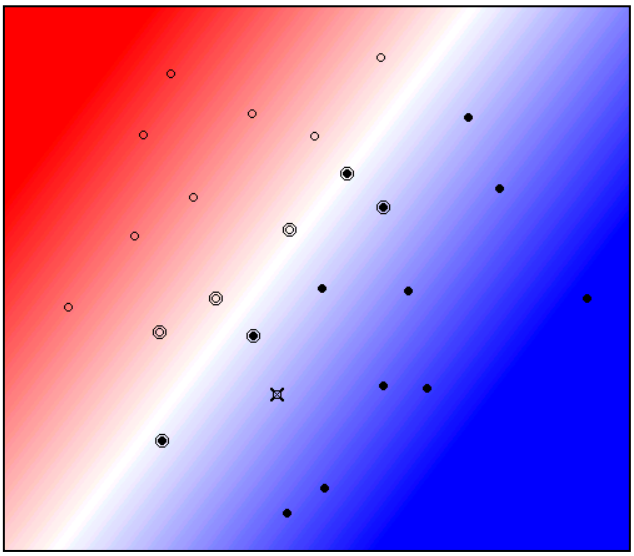
2 errori, margine maggiore



Maggior Overfitting

$C = 200$

1 solo errore, margine minore



è più facile trovare un iperpiano lineare in uno spazio di dimensione più alta che una superficie curva in uno spazio di dimensione inferiore.

SVM Non lineari

SVM prevede un'importante estensione della teoria inizialmente sviluppata per iperpiani, al caso (non lineare) di separazione dei pattern con superfici anche molto complesse. Tutto ciò avviene in modo molto semplice:

- Viene definito un *mapping* Φ non lineare dei pattern dallo spazio di partenza $\Re^d$ verso uno spazio $\Re^m$ a più alta dimensionalità $(m > d)$: Questa trasformazione porta un'esplosione di dimensionalitá (curse of dimensionality)

$$\Phi: \Re^d \rightarrow \Re^m, \Phi(\mathbf{x}) = [g_1(\mathbf{x}), g_2(\mathbf{x}), \dots g_m(\mathbf{x})]$$

Trovare un iperpiano lineare nello spazio R^m equivale a trovare una superficie di separazione arbitrariamente complessa nello spazio originale R^d.

- Nello spazio $\Re^m$, dove maggiori sono i gradi di libertà, i pattern $\Phi(\mathbf{x}_1), \Phi(\mathbf{x}_2), \dots \Phi(\mathbf{x}_n)$ possono essere più facilmente separati da un iperpiano utilizzando la teoria nota. Ciò equivale a separare i pattern $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots \mathbf{x}_n$ in $\Re^d$ con superfici arbitrariamente complesse.

Analizzando la formulazione del problema lagrangiano-duale, si nota che i vettori del training set appaiono solo in forma di prodotti scalari tra coppie di vettori. Questa proprietà (*fondamentale*) permette di evitare la manipolazione di vettori nello spazio $\Re^m$.

Infatti, per opportuni mapping Φ è possibile ricondurre il prodotto scalare di due pattern mappati nello spazio $\Re^m$ a una funzione K (detta Kernel) dei due pattern originali nello spazio $\Re^d$.

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

La Funzione Kernel è una funzione che calcola il prodotto scalare nello spazio ad alta dimensione senza dover mai calcolare esplicitamente le coordinate Phi(x) e Phi(x').

Questo approccio ci permette di allenare un SVM non lineare con la stessa complessità computazionale di un SVM lineare, ma con la potenza discriminatoria della non linearità.

Per il teorema di Mercer se la funzione Kernek K soddisfa alcuni requisiti (es. è continua e simmetrica rispetto agli argomenti) allora esiste un mapping Φ verso uno spazio di dimensionalità maggiore che gode della suddetta proprietà. E' dunque possibile utilizzare K senza nemmeno conoscere il corrispondente Φ (ad esempio nel caso di Kernel RBF, m = infinito).

Se dovessimo calcolare esplicitamente il mapping Phi(x) per ogni punto e poi applicare l'SVM standard, l'operazione sarebbe insostenibile perché: Il calcolo esplicito di Phi(x) in uno spazio ad alta dimensione è computazionalmente proibitivo. Inoltre, La complessità del training (O(n^2 * m)) aumenterebbe enormemente.

Tramite Kernel, non viene applicata direttamente la trasformazione, ma in modo interno.
Tramite Kernel calcolo il prodotto scalare di (X,X') nella dimensione 'd' senza passare mai in 'm'.

SVM Non lineari: Kernel functions

In m, ho un iperpiano. In d, ho un ipersuperficie (una figura complessa). Ció avviene retropropagando da m in d

- Polinomio di grado q (iperparametro):

  Le componenti $g_i(\mathbf{x}), i = 1..m$ sono ottenute come tutte le possibili combinazioni di elevamento a potenze $\leq q$ delle componenti di $\mathbf{x}$. Ad esempio per $d = 2$, $q = 2$:

  $$\Phi(\mathbf{x}) = \Phi([x_1, x_2]) = [1, x_1, x_2, x_1x_2, {x_1}^2, {x_2}^2, {x_1}^2x_2, x_1{x_2}^2, {x_1}^2{x_2}^2]$$

  per un grado q, include tutte le possibili combinazioni di monomi fino al grado q.

  e quindi $m = 9$.

  Si dimostra che:

  $$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = [(\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}') + 1]^q$$

  Aumentando q, aumenta la complessità della superficie di separazione e il rischio di overfitting.

- Radial Basis Function (RBF) di ampiezza σ (iperparametro):

  Questo valore misura la somiglianza tra x e x'. È massimo (vicino a 1) se i due punti sono vicini e si avvicina a 0 se sono lontani.

  Mapping in uno spazio di feature di dimensionalitá infinita

  $$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = e^{\left(-\frac{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}'\|^2}{2\sigma^2}\right)}$$

  sigma= ampiezza gaussiana

- Sigmoid (meno utilizzato):

  $$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = tanh(v(\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}') + a)$$

  v ed a (iperparametri) devono essere scelti opportunamente: una possibile scelta è: $v = 1, a = 1$

Utilizzando il kernel trick si può risolvere il problema di ottimizzazione senza particolari complicazioni rispetto al caso lineare. Una volta determinati gli ${\alpha_i}^*$, la superficie di separazione (regola di classificazione) è esprimibile come:

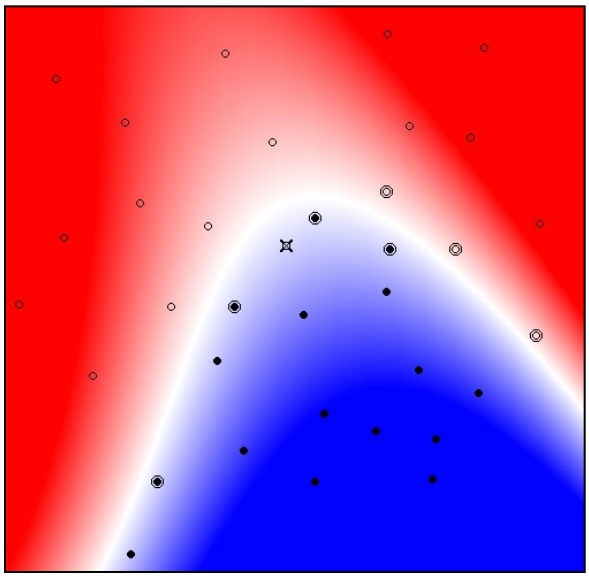
$$D(\mathbf{x}) = \sum_{i=1\ldots n} {\alpha_i}^* y_i K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) + b^*$$

SVM non ritorna probabilitá, ma D(X) (distanza).
Ci sono tecniche di calibrazione che usano parte del dataset per convertire distanza in probabilitá

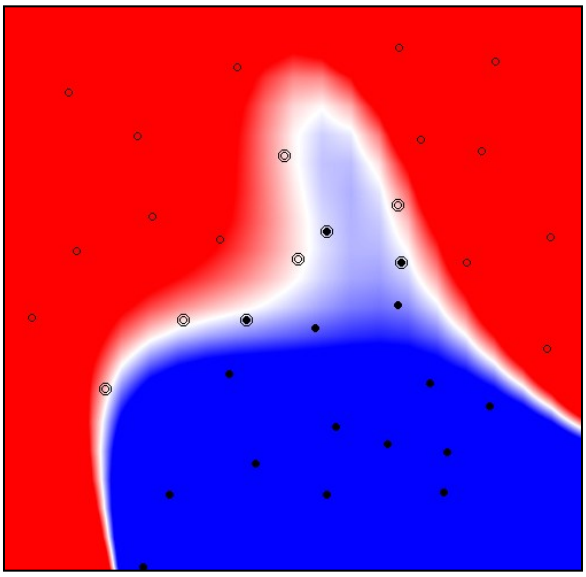
SVM Non lineari: Esempi

RBF sono piú regolari, stabili numericamente e piú efficaci nell'isolare le classi tra loro rispetto a Kernel Polinomiale

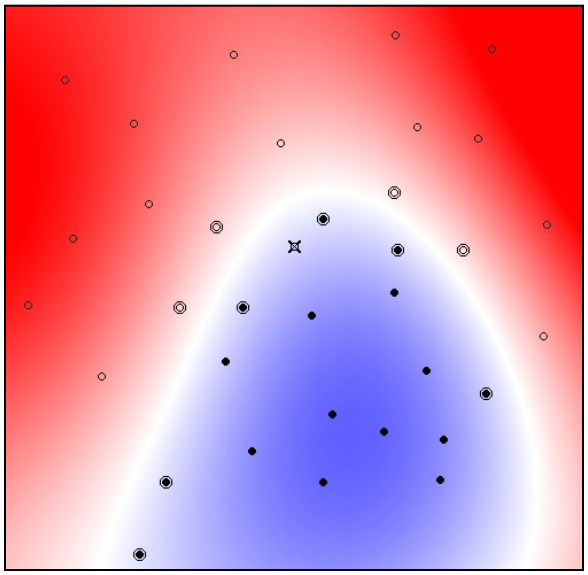
Polinomio $q = 2$



Polinomio $q = 10$

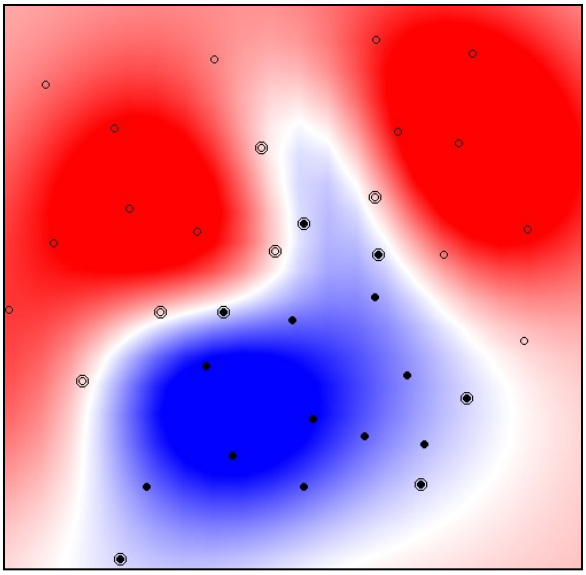


RBF $\sigma = 1$



gamma e sigma sono inversamente proporzionali
gamma = 1/2*(sigma^2)

RBF $\sigma = 0.2$



sigma Grande -> gamma Piccolo: Se sigma è grande, la campana Gaussiana è larga (ampia). Il raggio di influenza di un Support Vector è esteso. Questo porta a confini di decisione più lisci (tendenza all'Underfitting).
sigma Piccolo -> gamma Grande: Se sigma è piccolo, la campana Gaussiana è stretta (concentrata). Il raggio di influenza è limitato. Questo porta a confini di decisione molto fratturati e sensibili ai singoli punti (tendenza all'Overfitting).

SVM: estensione multiclasse

SVM è in grado di determinare la superficie di separazione tra 2 classi di pattern; come gestire allora i problemi con più di 2 classi ?

Si tratta di un problema ancora aperto anche se esistono diverse soluzioni; le più utilizzate sono:

- One-Against-One: che studieremo in seguito nell'ambito dei multi-classificatori. Ogni combinazione Classe-Classe con tutte le classi (1vs1 fatto per tutte le classi)
  Si usa OvO quando il numero di classi é piccolo (k*(k-1) SVM)

- One-Against-All:

  k = classe
  n = num classi

  - Date s classi, $w_1, w_2 \dots w_s$
  - Per ogni classe w_k, si determina con SVM la superficie di separazione tra i pattern di w_k (etichettati +1) da una parte, e i pattern di tutte le rimanenti classi w_h, $h \neq k$ (etichettati -1) dall'altra, ottenendo la funzione $D_k(\mathbf{x})$ che indica quanto $\mathbf{x}$ è distante dalla superficie decisionale in direzione di w_k. Maggiore è $D_k(\mathbf{x})$ più confidenti siamo dell'appartenenza di $\mathbf{x}$ a w_k.
  - Al termine del training, si assegna il pattern $\mathbf{x}$ alla classe k^* per cui è massima la distanza dalla superficie decisionale:

$$k^* = arg \max_k \{D_k(\mathbf{x})\}$$

Nota: È necessario eseguire s training SVM

SVM: implementazione

Il training di SVM, richiede algoritmi numerici non banali in grado di risolvere un problema di programmazione quadratica. Alcune implementazioni sono disponibili on-line:

- LIBSVM - http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm
  - Attenzione i Kernel (RBF, ecc.) sono parametrizzati in modo diverso da quello comune (vedi *Readme.txt* di LibSvm e [1]). In particolare si fa uso del parametro gamma (γ) per regolare la complessità della superficie decisionale. Aumentando γ la superficie può assumere forme più complesse.
    - *N.B. Con kernel RBF γ opera in modo inverso rispetto a σ.*
    - *Inserito γ anche nel kernel polinomiale (oltre al grado polinomio e Coef0)*
  - Per la classificazione multiclasse utilizza internamente One-Against-One [2] (accurato ma inefficiente per molte classi).
  - Wrapped da Scikit-Learn → sklearn.svm.SVC

[1] C.W. Hsu, C.C. Chang, and C.J. Lin, *A Practical Guide to Support Vector Classification,* disponibile sul sito web di LIBSVM

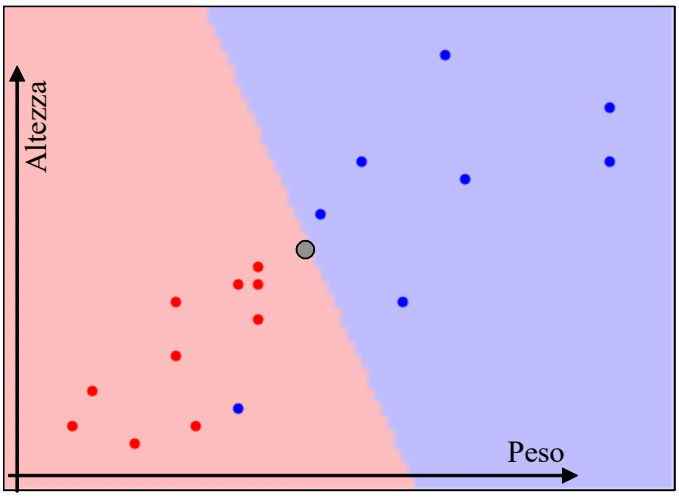
[2] C.C. Chang and C.J. Lin. *LIBSVM: a library for support vector machines.* ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology, 2:27:1--27:27, 2011, disponibile sul sito web di LIBSVM

Piú ottimizzata rispetto a LIBSVM per quanto riguarda il training di SVM lineari

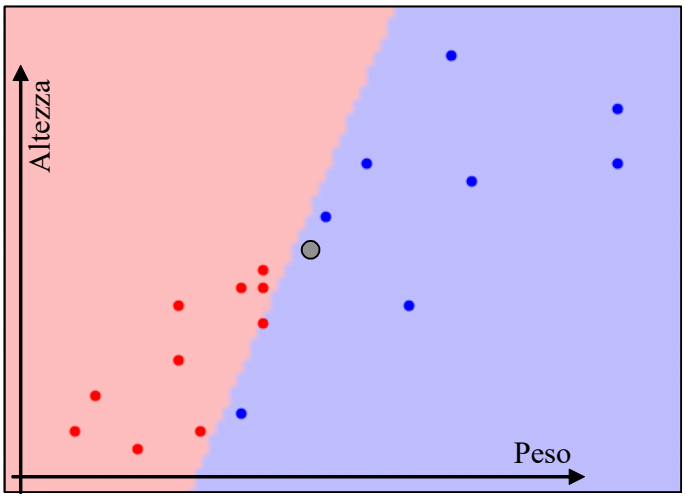
- LIBLINEAR - https://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/liblinear/
  - Stessi autori di LIBSVM, consigliata nel caso lineare per elevata dimensionalità ed elevato numero di pattern.
  - Wrapped da Scikit-Learn → sklearn.svm.LinearSVC

- SVM-light - http://svmlight.joachims.org

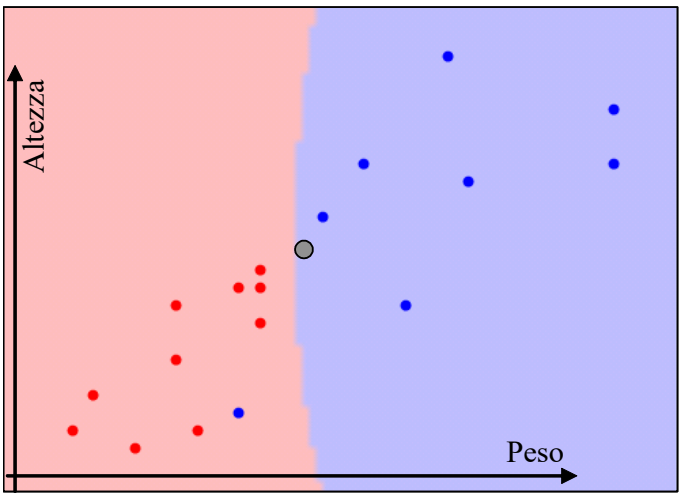
Esempi LibSvm (1)
«maschi-femmine»



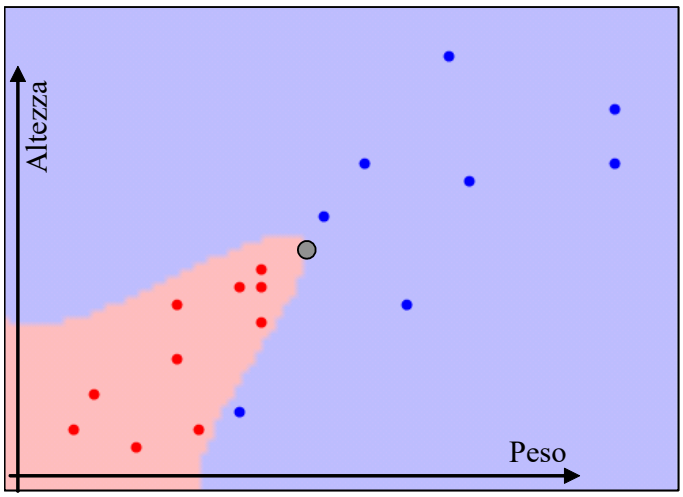
Lineare, $C = 10$



Lineare, $C = 500$

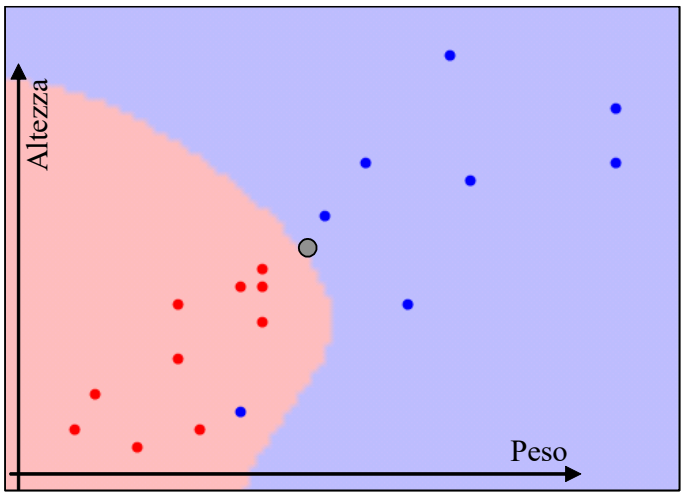


Polinomio $q = 3, C = 10$

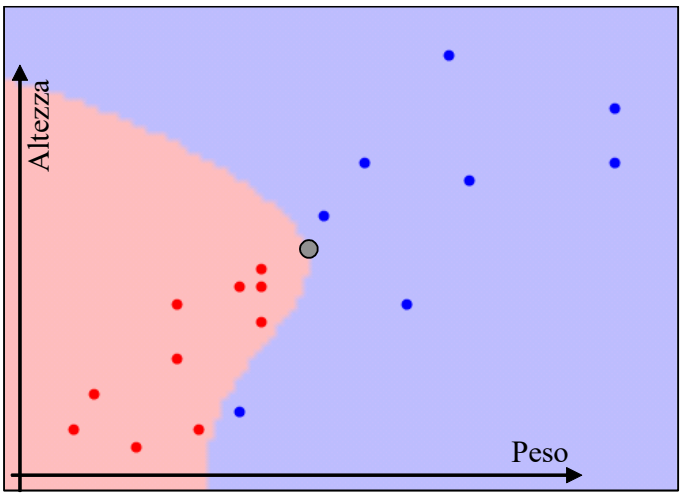


Polinomio $q = 3, C = 500$

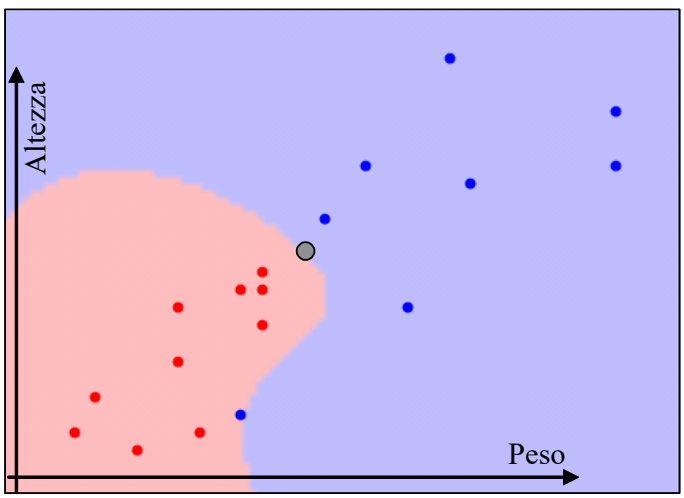
Esempi LibSvm (2)
«maschi-femmine»



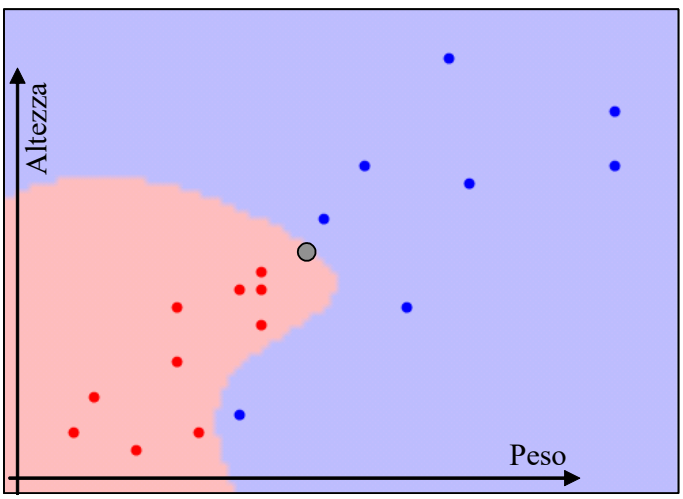
RBF, $\gamma = 5, C = 10$



RBF,$\gamma = 5, C = 500$

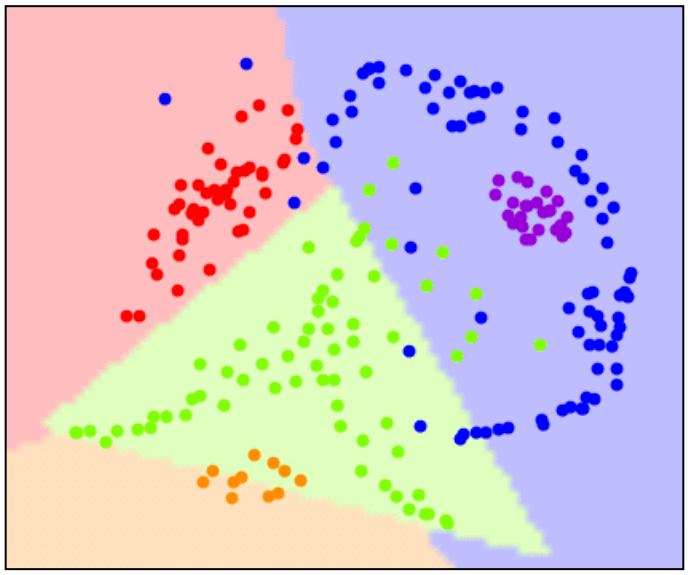


RBF,$\gamma = 10, C = 10$

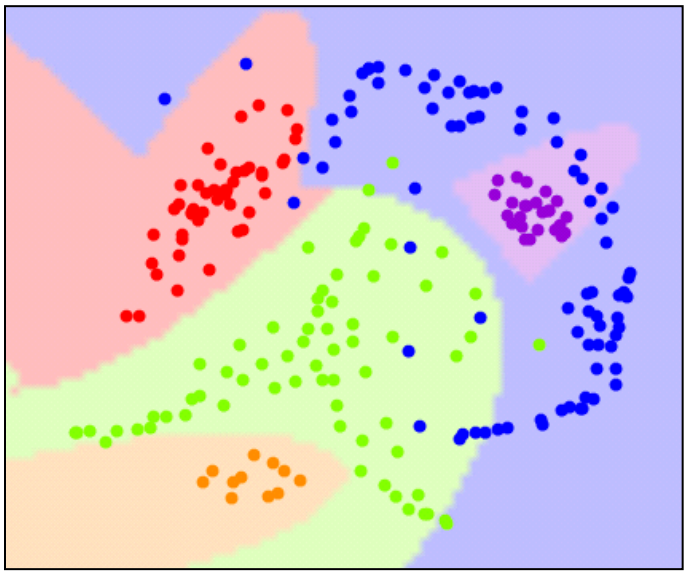


RBF,$\gamma = 10, C = 500$

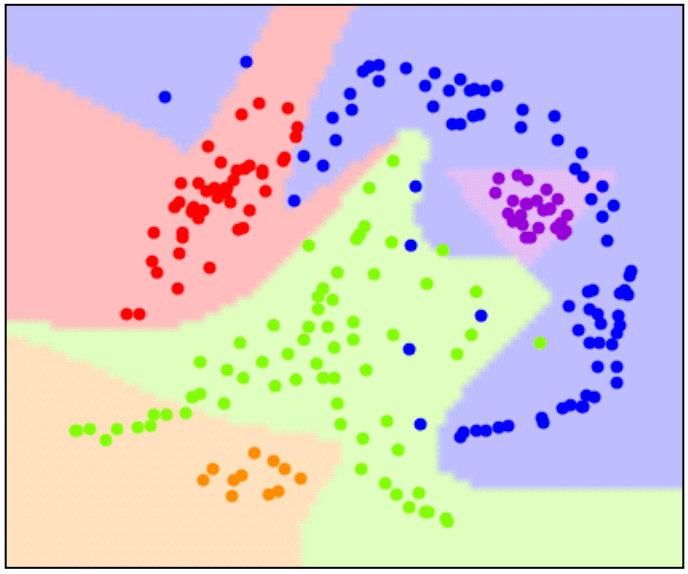
Esempi LibSvm (3)
multiclasse



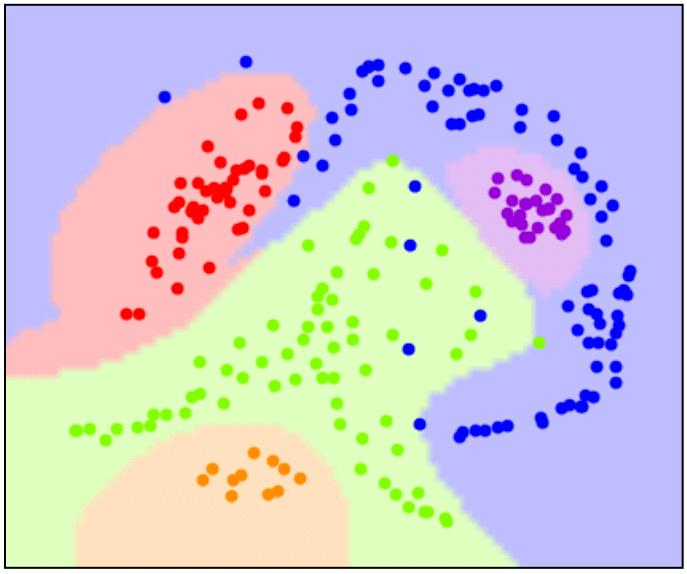
Lineare, $C = 100$



Polinomio $q = 2, C = 100$



Polinomio $q = 7, C = 100$



RBF, $\gamma = 5, C = 100$

SVM in pratica

- Quando usare SVM?
  - SVM permette di ottenere buoni risultati su dati numerici omogenei (anche di elevata dimensionalità), ma è meno performante di multi-classificatori basati su alberi decisionali (es. Random Forest) su dati tabulari eterogenei.

- Lineare o Non-lineare?
  - se la dimensionalità d dello spazio è molto elevata (es. 5000 feature) si utilizza generalmente SVM lineare. Infatti in uno spazio così grande i pattern sono tipicamente molto sparsi e anche «semplici» iperpiani sono in grado di separare le classi efficacemente. Il solo iperparametro da tarare è C.

    Usare SVM Lineare, perché diventa computazionalmente proibitivo calcolare il Kernel
  - per bassa dimensionalità (es. 20 feature) la scelta primaria è SVM non lineare con kernel RBF. Gli iperparametri da tarare sono C e σ (o γ se si utilizza LIBSVM).

    Possibilitá di prendersi maggiori gradi di libertá
  - Per media dimensionalità (es. 200 features) in genere si provano entrambe le tipologie (i.e., anche questa scelta diventa un iperparametro).
  - Come sempre gli iperparametri si tarano su un validation set separato, oppure attraverso cross-validation sul training set.

- Come gestire il caso multi-classe?
  - Tipicamente ci si affida alla soluzione disponibile nella libreria utilizzata (One-Agaist-One per LIBSVM).
  - Se però il numero di classi è molto elevato, il costo può diventare inaccettabile per certe applicazioni. In questo caso One-Against-All diventa la scelta obbligata.

Multi-Classificatori
(Ensemble methods)

Un multi-classificatore è un approccio dove diversi classificatori sono utilizzati (*normalmente in parallelo, ma talvolta anche in cascata o in modo gerarchico*) per eseguire la classificazione dei pattern; le decisioni dei singoli classificatori sono *fuse* ad un certo livello del processo di classificazione.

È stato dimostrato (*teoricamente ma soprattutto nella pratica*) che l'utilizzo di *combinazioni di classificatori* (in inglese multi-classifier, combination of classifiers, classifier fusion, ensemble learning) può migliorare, anche molto, le prestazioni.

- Siate pragmatici! Nella pratica investire tempo nell'ottimizzazione «spinta» di un singolo classificatore è in genere meno conveniente rispetto all'affiancamento (al classificatore iniziale) di altri classificatori.
- Attenzione però: la combinazione è efficace solo quando i singoli classificatori sono (almeno parzialmente) *indipendenti tra loro*, ovvero non commettono gli stessi errori.
- L'indipendenza (o diversità) è normalmente ottenuta:
  - Utilizzando feature diverse (non correlate o poco correlate)
  - Utilizzando algoritmi diversi per l'estrazione delle feature
  - Utilizzando diversi algoritmi di classificazione
  - Addestrando lo stesso algoritmo di classificazione su porzioni diverse del training set (*bagging*)
  - Insistendo con l'addestramento sugli errori commessi dai predecessori (*boosting*)
- La combinazione può essere eseguita a *livello di decisione* o a *livello di confidenza*.

Fusione a livello di decisione

Ogni singolo classificatore fornisce in output la propria decisione che consiste nella classe cui ha assegnato il pattern. Le decisioni possono essere tra loro combinate in diversi modi, tra cui:

- Majority vote rule: è uno dei più noti e semplici metodi di fusione; ogni classificatore vota per una classe, il pattern viene assegnato alla classe maggiormente votata.

  Più formalmente:

  Se $\{C_1, C_2, \dots C_{nc}\}$ è un insieme di nc classificatori, e

  $$\theta_{ij} = \begin{cases} 1 & se\ i\ \text{è}\ la\ classe\ votata\ da\ C_j \\ 0 & altrimenti \end{cases} \qquad (1 \le i \le s, 1 \le j \le nc)$$

  Allora il pattern è assegnato alla classe t tale che:

  $$t = \underset{i=1..s}{arg\,max}\left\{\sum_{j=1\dots nc} \theta_{ij}\right\}$$

- Borda count: ogni classificatore invece di una singola classe, produce una classifica o ranking delle classi (dalla prima all'ultima) a seconda della probabilità che a ciascuna di esse appartenga il pattern da classificare.

  I ranking sono convertiti in punteggi e poi sommati; la classe con il più elevato punteggio finale è quella scelta dal multi-classificatore.

  Rispetto a majority vote rule, considera anche i «non primi» di ogni classificatore.

Prestazioni teoriche

- Dato un problema di classificazione binario e un multi-classificatore costituito da nc classificatori (nc dispari), la majority vote rule classifica il pattern come appartenente alla classe che ha ottenuto almeno $k = (nc + 1)/2$ voti.
- Sia P la probabilità che ogni singolo classificatore esegua la classificazione correttamente, la probabilità $P_{multi}(nc)$ che la decisione del multi-classificatore sia corretta è esprimibile attraverso la distribuzione binomiale:

$$P_{multi}(nc) = \sum_{m=k}^{nc} \binom{nc}{m} P^m (1-P)^{nc-m}$$

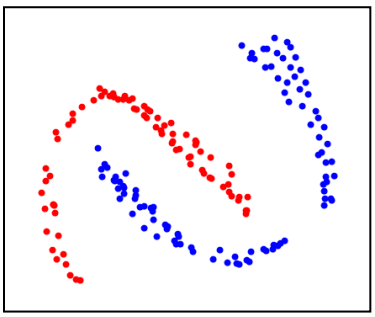
Ricorda, la distribuzione binomiale permette di calcolare con quale probabilità estraiamo m palline rosse da un'urna contenete nc palline, se P è la probabilità di estrarne una rossa in un singolo tentativo.

Nella formula di $P_{multi}(nc)$ i casi favorevoli sono quelli in cui un numero di classificatori compreso tra k e nc hanno effettuato classificazione corretta.

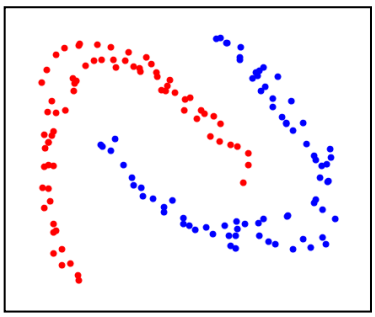
- Esempio: se $P = 0.8$ (ogni classificatore commette il 20% di errore di classificazione) stando alla formula precedente per un multi-classificatore con nc (variabile) componenti:
  - $P_{multi}(3) = 0.896 \quad (k = 2)$
  - $P_{multi}(5) = 0.942 \quad (k = 3)$
  - $P_{multi}(7) = 0.966 \quad (k = 4)$
  - $P_{multi}(9) = 0.980 \quad (k = 5)$
  - $P_{multi}(15) = 0.995 \quad (k = 8)$
  - $P_{multi}(21) = 0.999 \quad (k = 11)$ Eccezionale !!!

Dov'è il trucco? La formula precedente è basata sull'indipendenza (totale) dei classificatori, cosa difficilmente ottenibile in pratica!

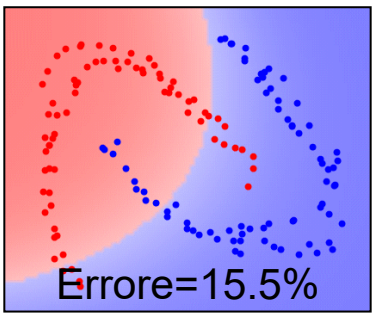
Majority vote rule (esempio)



Training set

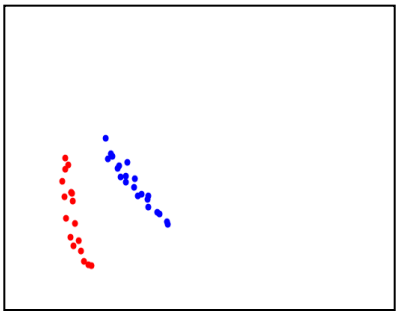


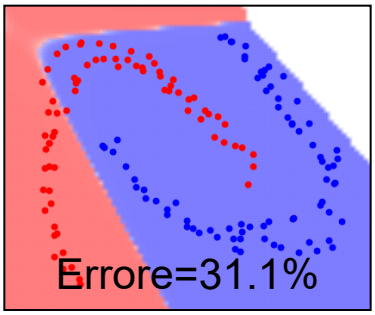
Test set



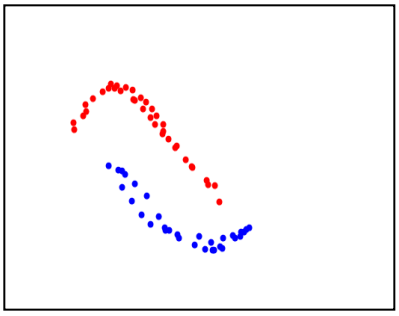
(Bayes – Distr. Normali)

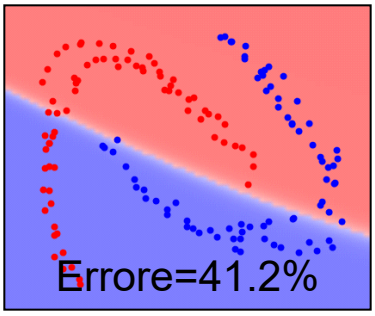
Dividendo il training set in 3 parti e addestrando 3 classificatori (stesso tipo):

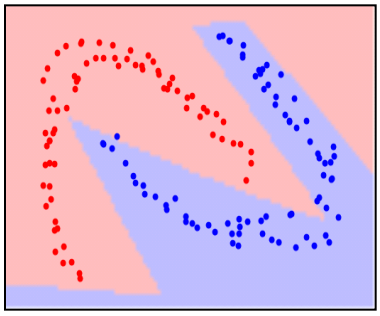




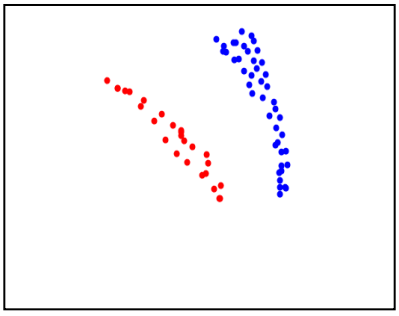
Majority vote rule:

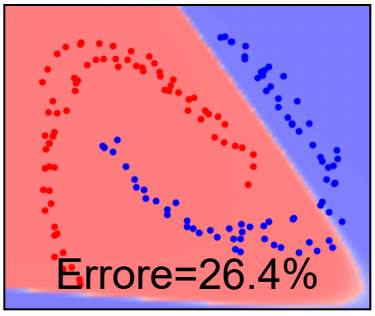






Errore=0.7%





One-Against-One

L'approccio One-Against-One, consente di risolvere un problema di classificazione multi-classe, attraverso classificatori binari.

È l'approccio adottato dalla libreria LIBSVM (usata in BioLab).

- Se s sono le classi del problema, si addestrano $s \times (s-1)/2$ classificatori binari: tutte le possibili coppie, indipendentemente dall'ordine.
- Durante la classificazione, il pattern $\mathbf{x}$ viene classificato da ogni classificatore binario, che assegna un voto alla classe (tra le due) più probabile.
- Al termine il pattern $\mathbf{x}$ è assegnato alla classe che ha ricevuto più voti (*majority vote rule*).

È in genere più accurato di One-Against-All (discusso in precedenza per SVM), anche se meno efficiente in quanto richiede l'addestramento di un numero maggiore di classificatori.

Fusione a livello di confidenza (1)

Ogni singolo classificatore C_j, $j = 1..nc$ fornisce in output la confidenza di classificazione del pattern rispetto a ciascuna delle classi, ovvero un vettore $\mathbf{conf}_j = [conf_{j1}, conf_{j2} \ldots conf_{js}]$ in cui l'i-esimo elemento indica il grado di appartenenza del pattern alla classe i-esima.

Diversi metodi di fusione sono possibili tra cui: somma (sum), prodotto (prod), massimo (max) e minimo (min):

- $\mathbf{sum} = \sum_{j=1\ldots nc} \mathbf{conf}_j$ $\quad t = \underset{i=1\ldots s}{arg\,max}\{ sum_i \}$
- $\mathbf{prod} = \prod_{j=1\ldots nc} \mathbf{conf}_j$ $\quad t = \underset{i=1\ldots s}{arg\,max}\{ prod_i \}$
- $max_i = \underset{j=1\ldots nc}{max}\{ conf_{ji} \}$ $\quad t = \underset{i=1\ldots s}{arg\,max}\{ max_i \}$
- $min_i = \underset{j=1\ldots nc}{min}\{ conf_{ji} \}$ $\quad t = \underset{i=1\ldots s}{arg\,max}\{ min_i \}$

- Il criterio del minimo può sembrare illogico. *Attenzione scegliamo il massimo dei minimi … quindi una classe che non ha ricevuto confidenza troppo bassa da nessun classificatore.*
- Il prodotto è il metodo «probabilisticamente» più corretto (la probabilità congiunta si calcola come prodotto di probabilità) ma solo nel caso di indipendenza statistica.
- Nella pratica la somma è spesso preferibile al prodotto in quanto più robusta. Infatti nel prodotto è sufficiente che un solo classificatore indichi confidenza zero per una classe per portare a zero la confidenza del multi-classificatore per quella classe.

Fusione a livello di confidenza (2)

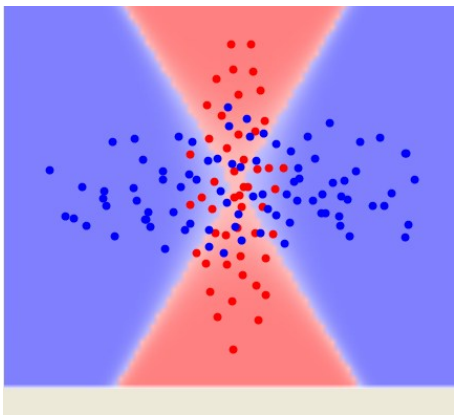
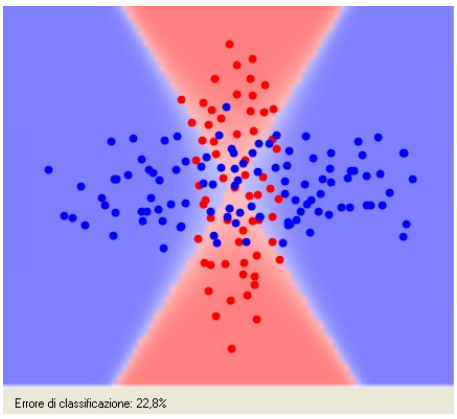
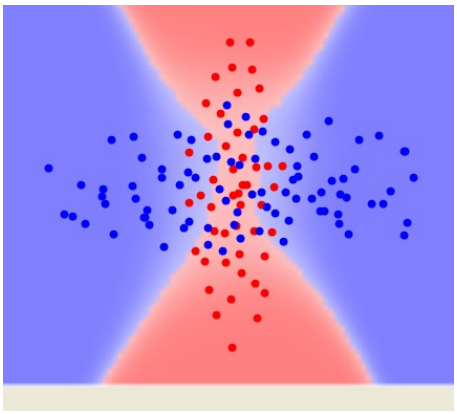
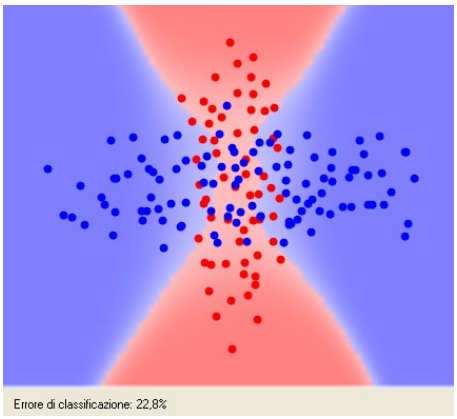
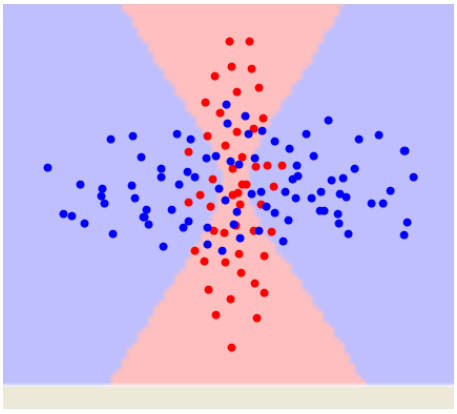
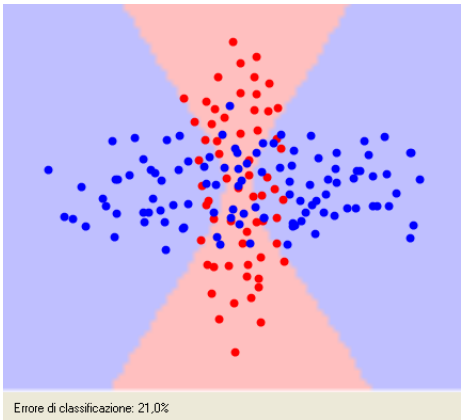
- Una variante efficace, è quella della somma pesata, dove la somma dei vettori confidenza è eseguita pesando i diversi classificatori in base al loro grado di abilità g_j.

$$\mathbf{avgsum} = \sum_{j=1\ldots nc} g_j \cdot \mathbf{conf}_j \qquad t = \underset{i=1\ldots s}{arg\,max}\{\, avgsum_i \,\}$$

  I gradi di abilità possono essere definiti in base alle singole prestazioni dei classificatori, ad esempio in maniera inversamente proporzionale all'errore di classificazione (vedi AdaBoost).

- Attenzione alla normalizzazione dei vettori di confidenza nel caso in cui essi non siano probabilità (ma ad esempio similarità). *Riferimento a quanto detto per la normalizzazione delle distanze*.

Fusione a livello di confidenza: esempio

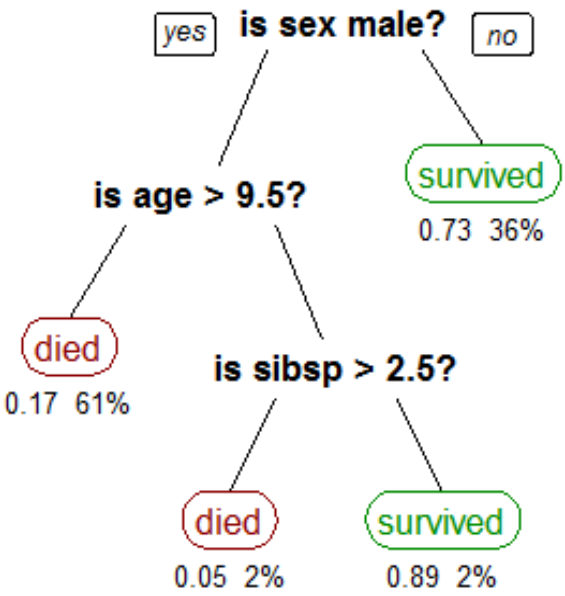
	Training Set	Test Set
Bayes parametrico (normali)		 Errore=22.8%
Bayes & Parzen (normali h=10)		 Errore=22.8%
Fusione a livello di confidenza (somma)		 Errore=21.0%

Random Forest

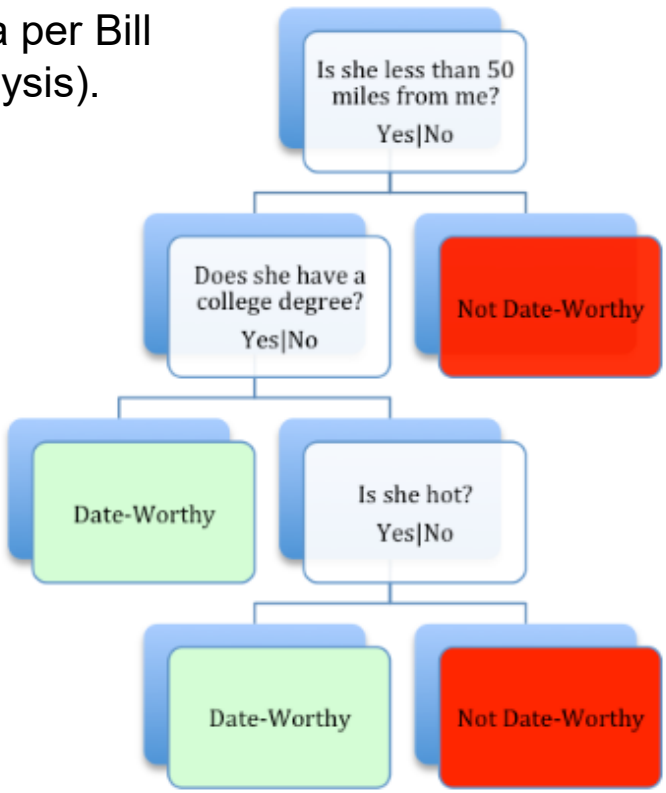
- Ideato da Leo Breiman nel 2001.
- Appartiene alla famiglia di metodi di Bagging (Boostrap Aggregating):
  - Estrazione con re-imbussolamento di un sottoinsieme S_j di pattern dal training set (tipicamente i 2/3 del totale).
  - Addestramento del classificatore C_j sul sottoinsieme S_j
  - Fusione dei classificatori (e.g., majority vote rule, somma)
- In Random Forest i singoli classificatori sono classification tree (alberi di classificazione):
  - I classification tree sono uno strumento molto utilizzato in applicazioni con pattern categorici o mixed (es. Data Mining). Per pattern numerici «puri» in genere non sono competitivi con SVM se considerati singolarmente.
  - Esistono diversi tipi di alberi, tra cui: ID3, C4.5, CART (default in Random Forest).
  - CART è un albero binario in cui ogni nodo divide i pattern del training set (assegnandoli ai due nodi figli). La suddivisione si basa sul confronto di una singola feature con una soglia.
  - Per la «crescita» dell'albero a partire da un training set, si sceglie (in modo greedy) ad ogni livello la coppia (feature, soglia di suddivisione) che meglio separa le classi. Vedi [A. Géron] per maggiori dettagli.
  - Per la classificazione di un nuovo pattern si visita l'albero e una volta giunti a una foglia, si classifica il pattern sulla base della classe più comune nel nodo (tra i pattern del training set): majority vote rule.

Esempi di classification tree

- Sopravvivenza passeggeri del Titanic (fonte Wiki).
  - Classi: died e survived
  - **sibsp**: numero familiari a bordo.
  - I numeri sotto le foglie indicano la probabilità di sopravvivenza (sinistra) e la percentuale di campioni nella foglia (destra).



- La partner giusta per Bill (fonte GormAnalysis).



Random Forest (2)

- In Random Forest, per rendere maggiormente indipendenti i classificatori (tree):
  - per ogni nodo la scelta della feature migliore su cui partizionare non è fatta sull'intero insieme delle d feature (dimensionalità dei pattern), ma su un sottoinsieme random di d' feature. Valore tipico $d' = \sqrt{d}$
  - In assenza di questo accorgimento (noto anche come feature bagging) molti tree sceglierebbero con elevata probabilità le stesse variabili (quelle più discriminanti).
  - Pertanto Random Forest opera simultaneamente due tipi di bagging: uno sui pattern del training set e uno sulle features.
- Il numero di tree (iperparametro n_estimators) in una forest varia generalmente da alcune centinaia ad alcune migliaia. Aumentare n_estimators oltre al valore ottimale in genere non produce overfitting (ma rende il sistema meno efficiente).
- Gli alberi possono essere fatti crescere fino a quando lo split dei nodi termina naturalmente (in quanto non porta a una migliore separazione delle classi) oppure imponendo una massima profondità (iperparametro max_depth). Ridurre max_depth ha effetto regolarizzante e riduce overfitting.
- Grazie al bagging, le prestazioni possono essere stimate con tecnica Out-Of-Bag (OOB) che non richiede validation set separato.
  - La out-of-bag decision function (per random forest) in scikit-learn calcola, per ogni pattern, la prediction media di tutti gli alberi che non includono tale pattern nel loro bagging set.

AdaBoost

- Ideato da Freund and Schapire nel 1995.
- Appartiene alla famiglia dei metodi di boosting, dove:
  - più classificatori (tipicamente weak = deboli) sono combinati per realizzare un classificatore strong (forte).
  - a differenza del bagging, l'apprendimento è incrementale e prevede di aggiungere a ogni iterazione un classificatore efficace sui pattern critici.
  - ad ogni iterazione si assegna un peso a ciascun pattern del training set (aggiornando il peso precedente). Pattern classificati erroneamente hanno peso maggiore e contribuiscono maggiormente nella selezione del prossimo classificatore.

- Per semplicità nel seguito si introduce una versione binaria, ma esiste anche una versione multiclasse.

- Siano:
  - $(\mathbf{x}_1, y_1) \ldots (\mathbf{x}_n, y_n)$ i pattern del training set (TS) e le rispettive etichette, con $y_i \in \{+1, -1\}$
  - ${w_i}^t$ il peso del pattern $\mathbf{x}_i$ all'iterazione t
  - $h^t(\mathbf{x}) \rightarrow \{+1, -1\}$ il classificatore introdotto all'iterazione t e scelto tra i classificatori ${h_j}^t(\mathbf{x})$ disponibili all'iterazione t
  - α^t il peso del classificatore $h^t(\mathbf{x})$ nell'ambito del multi-classificatore.

AdaBoost: pseudocodice

$w_i{}^1 = \frac{1}{n},\ i = 1..n$ (tutti i pattern hanno lo stesso peso iniziale)

For $t = 1 \ldots T$

Normalizza i pesi (somma 1): $w_i{}^t / \sum_{j=1\ldots n} w_j{}^t \quad , i = 1..n$

Per ogni classificatore $h_j{}^t(\mathbf{x})$ disponibile (per la scelta)

Calcola errore (pesato sull'importanza dei pattern)

$$\epsilon_j = \sum_{i=1\ldots n} w_i{}^t \cdot I\left(h_j{}^t(\mathbf{x}_i) \neq y_i\right)$$

$$I(cond) = \begin{cases} 1 & cond = true \\ 0 & altrimenti \end{cases}$$

Scegli come $h^t(\cdot)$ il classificatore $h_j{}^t(\cdot)$ con minor ϵ_j

Calcola il peso del classificatore (vedi slide successiva)

$$\alpha^t = \frac{1}{2} ln\left(\frac{1-\epsilon^t}{\epsilon^t}\right), \qquad dove\ \ \epsilon^t = min\, \epsilon_j$$

Aggiorna i pesi (vedi slide successiva)

$$w_i{}^{t+1} = w_i{}^t \cdot e^{-\alpha^t y_i h^t(\mathbf{x}_i)}$$

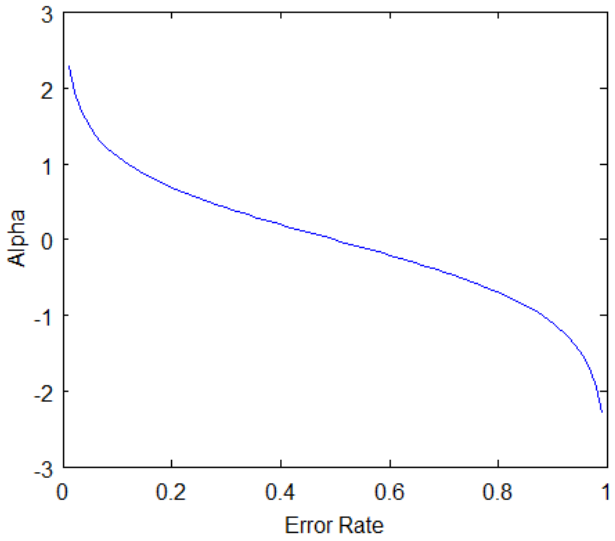
End for

Al termine dell'addestramento, il classificatore finale (strong) è la media pesata dei weak classifiers:

$$H(\mathbf{x}) = sign\left(\sum_{t=1\ldots T} \alpha^t h^t(\mathbf{x})\right)$$

AdaBoost: scelta dei pesi

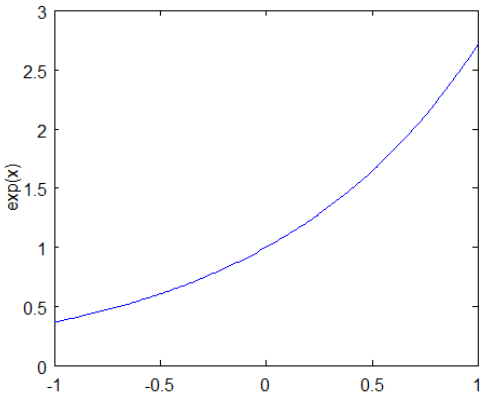
$$\alpha^t = \frac{1}{2} ln\left(\frac{1-\epsilon^t}{\epsilon^t}\right)$$



Un classificatore binario con errore 0.5 ha peso 0 (neutro), il peso aumenta esponenzialmente quando l'errore si avvicina a 0 e diventa negativo se l'errore è superiore a 0.5 (*fai l'opposto di ciò che dice il classificatore!*).

$$w_i{}^{t+1} = w_i{}^t \cdot e^z \quad \text{dove}$$

$$z = -\alpha^t y_i h^t(\mathbf{x}_i)$$



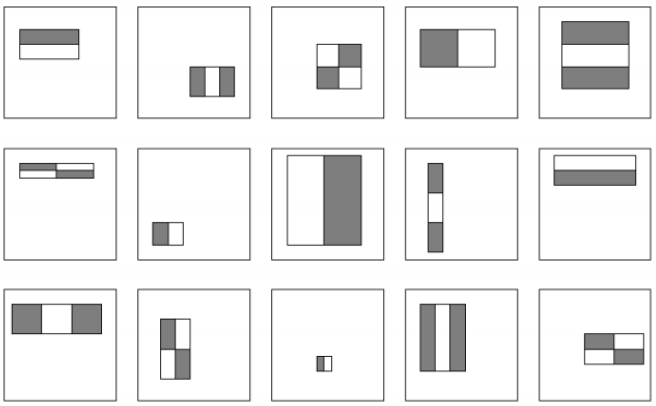
osservando che:

$$y_i\, h^t(\mathbf{x}_i) = \begin{cases} 1 & se\ il\ pattern\ \text{è}\ correttamente\ classificato \\ -1 & altrimenti \end{cases}$$

- $w_i{}^{t+1}$ aumenta se $z > 0$: α^t positivo e classificazione errata, oppure α^t negativo e classificazione corretta
- $w_i{}^{t+1}$ diminuisce se $z < 0$: nei 2 casi complementari.

Viola & Jones Face detector (2001)

- È una delle più note applicazioni di Adaboost.
  - I weak classifiers h_j sono scelti tra circa 160000 filtri rettangolari (Haar features) che possono essere calcolati in modo molto efficiente attraverso l'immagine integrale.



$$h_j(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \Sigma \text{ (pixels in white area)} - \Sigma \text{ (pixels in black area)} > \theta_j \\ -1 & altrimenti \end{cases}$$

- Per poter scartare velocemente non-face l'approccio di Viola & Jones utilizza una cascata di strong classifier (ciascuno ottenuto con AdaBoost) che operano sequenzialmente.
  - Se uno dei classificatori (ad un qualsiasi livello della sequenza) classifica il pattern come (non face) questo viene scartato immediatamente.
  - Gli strong classifier devono essere scelti e tarati per minimizzare i falsi negativi piuttosto che l'errore totale di classificazione.
  - I classificatori all'inizio della sequenza sono semplici e veloci (*il primo utilizza solo due weak classifiers e scarta circa il 50% dei pattern non-face*).

Gradient Boosting

- È una tecnica di boosting che invece di assegnare peso maggiore agli hard examples, cerca di addestrare i nuovi weak models sui residuali di errore (prodotti dai predecessori).
- L'implementazione più semplice (anche da capire) si applica al caso di regressione con loss MSE, maggiori dettagli sono forniti nelle slide sulla di regressione.
- L'implementazione ottimizzata XGBoost ha interfaccia fit/predict standard di scikit-learn è può essere facilmente aggiunta al toolkit dei modelli da considerare per la risoluzione di un problema. Vedi link.