ANALÝZA A KLASIFIKACE DAT

prof. Ing. Jiří Holčík, CSc.

MU IBA

EVROPSKÁ UNIE

MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

IV. LINEÁRNÍ KLASIFIKACE

☙ pokračování ❧

ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ

Algoritmus podpůrných vektorů (Support vector machines - SVM) je metoda strojového učení. SVM hledá nadrovinu, která v prostoru příznaků optimálně rozděluje trénovací data.

Optimální nadrovina je taková, že body leží v opačných poloprostorech a hodnota minima vzdáleností bodů od roviny je co největší. Jinými slovy, okolo nadroviny je na obě strany co nejširší pruh bez bodů.

Na popis nadroviny stačí pouze nejbližší body, kterých je obvykle málo - tyto body se nazývají *podpůrné vektory* (angl. support vectors) a odtud název metody. Tato metoda je ze své přirozenosti binární, tedy rozděluje data do dvou množin. Rozdělující nadrovina je lineární funkcí v prostoru příznaků.

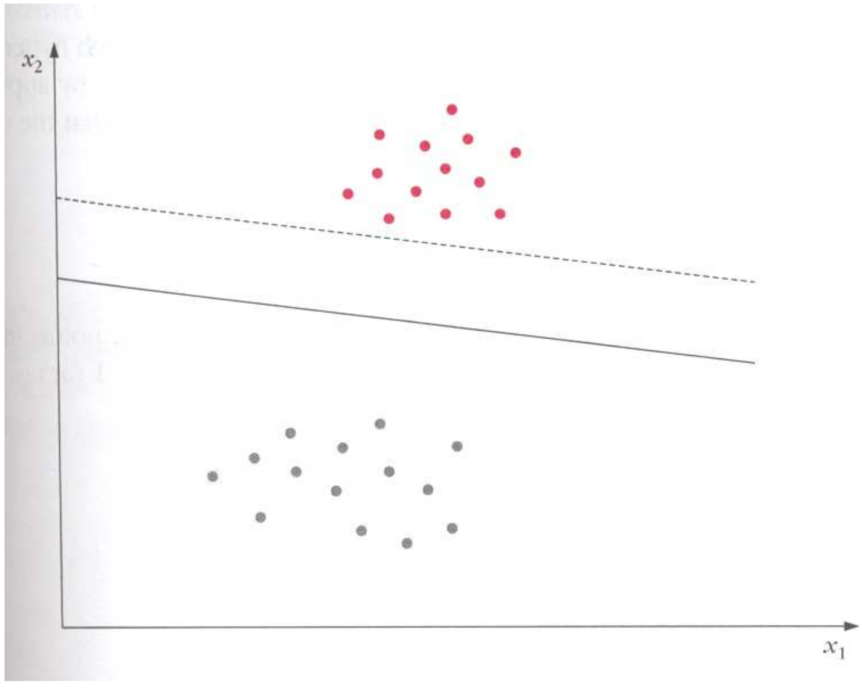
SEPARABILNÍ TŘÍDY

mějme v učební množině obrazy $\mathbf{x}_i$, i=1,2,…,n, ze dvou lineárně separabilních klasifikačních tříd ω_1 a ω_2

cílem je určení parametrů definující hranici

$$y(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0 = 0,$$

jejíž pomocí klasifikátor správně zařadí všechny obrazy z učební množiny

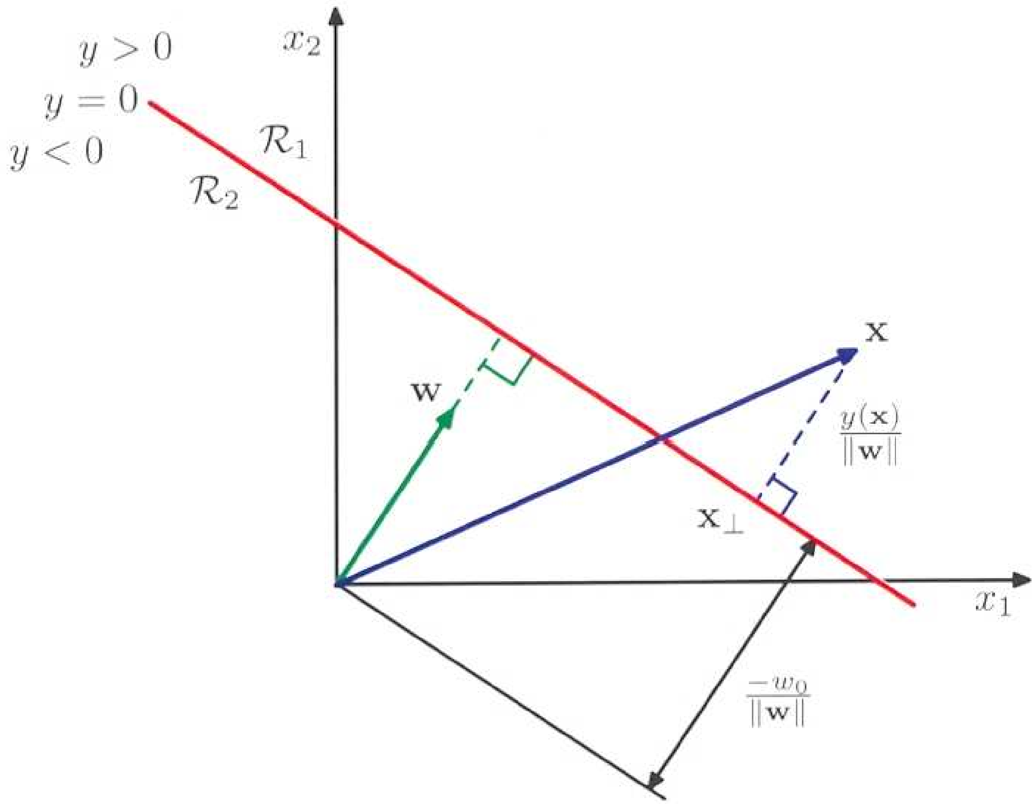


ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ
SEPARABILNÍ TŘÍDY

☑ připomenutí:

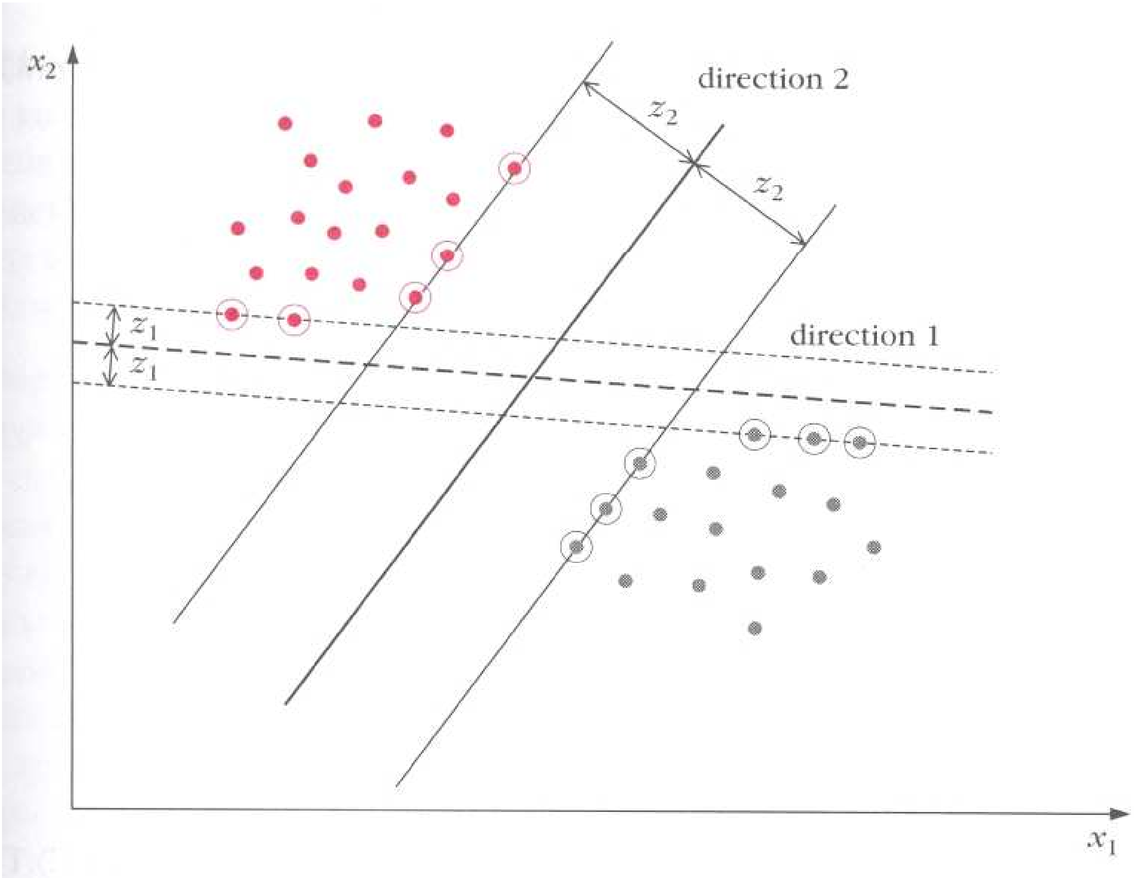
vzdálenost jakéhokoliv bodu od klasifikační hranice je

$$d = \frac{|y(\mathbf{x})|}{\|\mathbf{w}\|}$$



ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ
SEPARABILNÍ TŘÍDY

- určeme hodnoty váhového vektoru **w** a w_0 tak, aby hodnota y(**x**) v nejbližším bodě třídy ω_1 byla rovna 1 a pro ω_2 rovna -1



ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ

SEPARABILNÍ TŘÍDY

- ☑ máme „ochranné“ klasifikační pásmo o šířce

$$\frac{1}{\|\mathbf{w}\|} + \frac{1}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$$

a chceme

$$\mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0 \geq 1 \quad \text{pro } \forall \mathbf{x} \in \omega_1$$

$$\mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0 \geq -1 \quad \text{pro } \forall \mathbf{x} \in \omega_2$$

nebo také - chceme najít minimální

$$J(\mathbf{w}, w_0) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2$$

za předpokladu, že

$$t_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0) \geq 1, \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

kde t_i =+1 pro ω_1 a t_i =-1 pro ω_2

(minimalizace normy maximalizuje klasifikační pásmo)

ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ
SEPARABILNÍ TŘÍDY

- nelineární kvadratická optimalizační úloha se soustavou podmínek formulovaných pomocí lineárních nerovností
- Karushovy-Kuhnovy-Tuckerovy podmínky praví, že pro to musí být splněno

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} L(\mathbf{w}, w_0, \boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{0}$$

$$\frac{\partial}{\partial w_0} L(\mathbf{w}, w_0, \boldsymbol{\lambda}) = 0$$

$$\lambda_i \geq 0, i = 1, 2, \ldots, n$$

$$\lambda_i [t_i (\mathbf{w}^T \mathbf{x} + w_0) - 1] = 0, i = 1, 2, \ldots, n,$$

kde **λ** je vektor Langrangových součinitelů a L(**w**,w0, **λ**) je Lagrangova funkce definována vztahem

$$L(\mathbf{w}, w_0, \boldsymbol{\lambda}) = \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i [t_i (\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + w_0) - 1]$$

ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ
SEPARABILNÍ TŘÍDY

- když se všechny vztahy z předcházející strany dají dohromady dostaneme

$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i t_i \mathbf{x}_i$$

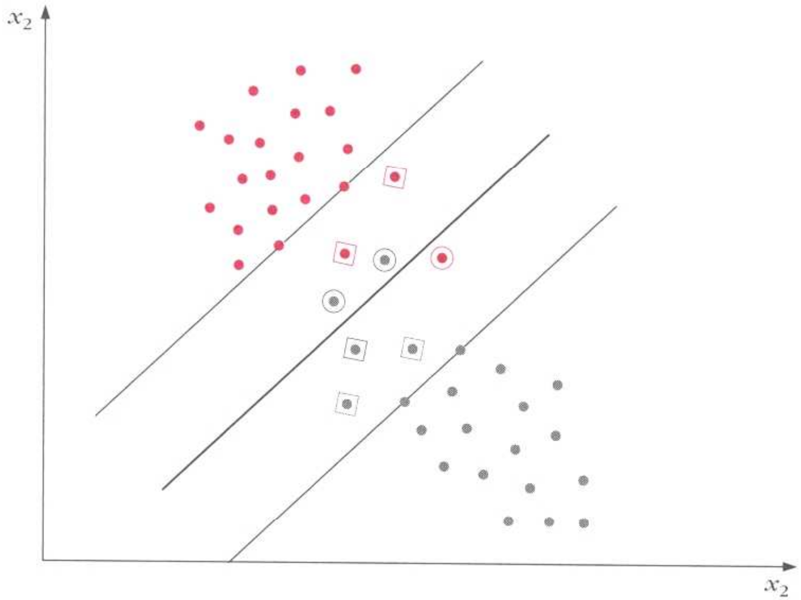
podpůrné vektory

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i t_i = 0$$

ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ
NESEPARABILNÍ TŘÍDY

- stále ale platí, že klasifikační „ochranné" pásmo je definováno dvěma paralelními „nadrovinami" definovanými

$$\mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0 = \pm 1$$



- obrazy z trénovací množiny patří do následujících tří kategorií:
  - obraz leží **vně** pásma a je **správně** klasifikován [platí podmínka $t_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}+w_0)\geq 1$ $i=1,2,\ldots,n$];
  - obraz leží **uvnitř** pásma a je **správně** klasifikován (čtverečky) [platí pro ně $0\leq t_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}+w_0)<1$];
  - obraz je chybně klasifikován (kolečka) [platí pro něj $t_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}+w_0)<0$]

ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ
NESEPARABILNÍ TŘÍDY

- všechny tři kategorie obrazů mohou být řešeny na základě pro daný typ specifických podmínek

$$t_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}+w_0)\geq 1-\xi_i$$

pomocí nově zavedených proměnných ξ_i (tzv. volné proměnné - slack variables).

První kategorie je pro $\xi_i=0$, druhá $0<\xi_i\leq 1$ a třetí pro $\xi_i>1$.

Cílem návrhu v tomto případě je vytvořit co nejširší „ochranné" pásmo, ale současně minimalizovat počet obrazů s $\xi_i>0$, což vyjadřuje kritérium se ztrátovou funkcí

$$J(\mathbf{w},w_0,\boldsymbol{\xi})=\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2+C\sum_{i=1}^{n}I(\xi_i)$$

kde $\boldsymbol{\xi}$ je vektor parametrů ξ_i a

$$I(\xi_i)=\begin{cases}1 & \xi_i>0\\ 0 & \xi_i=0\end{cases}$$

C je kladná korekční konstanta, která váhuje vliv obou členů v uvedeném vztahu.

ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ
NESEPARABILNÍ TŘÍDY

- optimalizace je obtížná, protože ztrátová funkce je nespojitá (díky funkci I(•)). V takových případech se proto používá náhradní ztrátová funkce

$$J(\mathbf{w}, w_0, \boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i$$

- a cílem návrhu je minimalizovat $J(\mathbf{w},w_0,\boldsymbol{\xi})$ za podmínek, že

$$t_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}+w_0)\geq 1-\xi_i \text{ a } \xi_i \geq 0,\ i=1,2,\dots,n.$$

- Problém lze opět řešit pomocí Langrangeovy funkce

$$L(\mathbf{w}, w_0, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = \frac{1}{2}\mathbf{w}^T\mathbf{w} + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i - \sum_{i=1}^{n}\mu_i\xi_i - \sum_{i=1}^{n}\lambda_i[t_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + w_0) - 1 + \xi_i]$$

ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ
NESEPARABILNÍ TŘÍDY

- ☑ příslušné Karushovy-Kuhnovy-Tuckerovy podmínky jsou

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{0} \text{ nebo } \mathbf{w} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i t_i \mathbf{x}_i;$$

$$\frac{\partial L}{\partial w_0} = 0 \text{ nebo } \sum_{i=1}^{n} \lambda_i t_i \mathbf{x}_i;$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_i} = 0 \text{ nebo } C - \mu_i - \lambda_i = 0, i = 1, 2, \ldots, n;$$

$$\lambda_i \left[t_i (\mathbf{w}^T \mathbf{x} + w_0) - 1 + \xi_i \right] = 0, i = 1, 2, \ldots, n;$$

$$\mu_i \xi_i = 0, i = 1, 2, \ldots, n;$$

$$\mu_i \geq 0, \lambda_i \geq 0, i = 1, 2, \ldots, n;$$

ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ

NESEPARABILNÍ TŘÍDY

- z čehož platí požadavek na maximalizaci $L(\mathbf{w}, w_0, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\mu})$ za podmínek

$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i t_i \mathbf{x}_i;$$

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i t_i = 0;$$

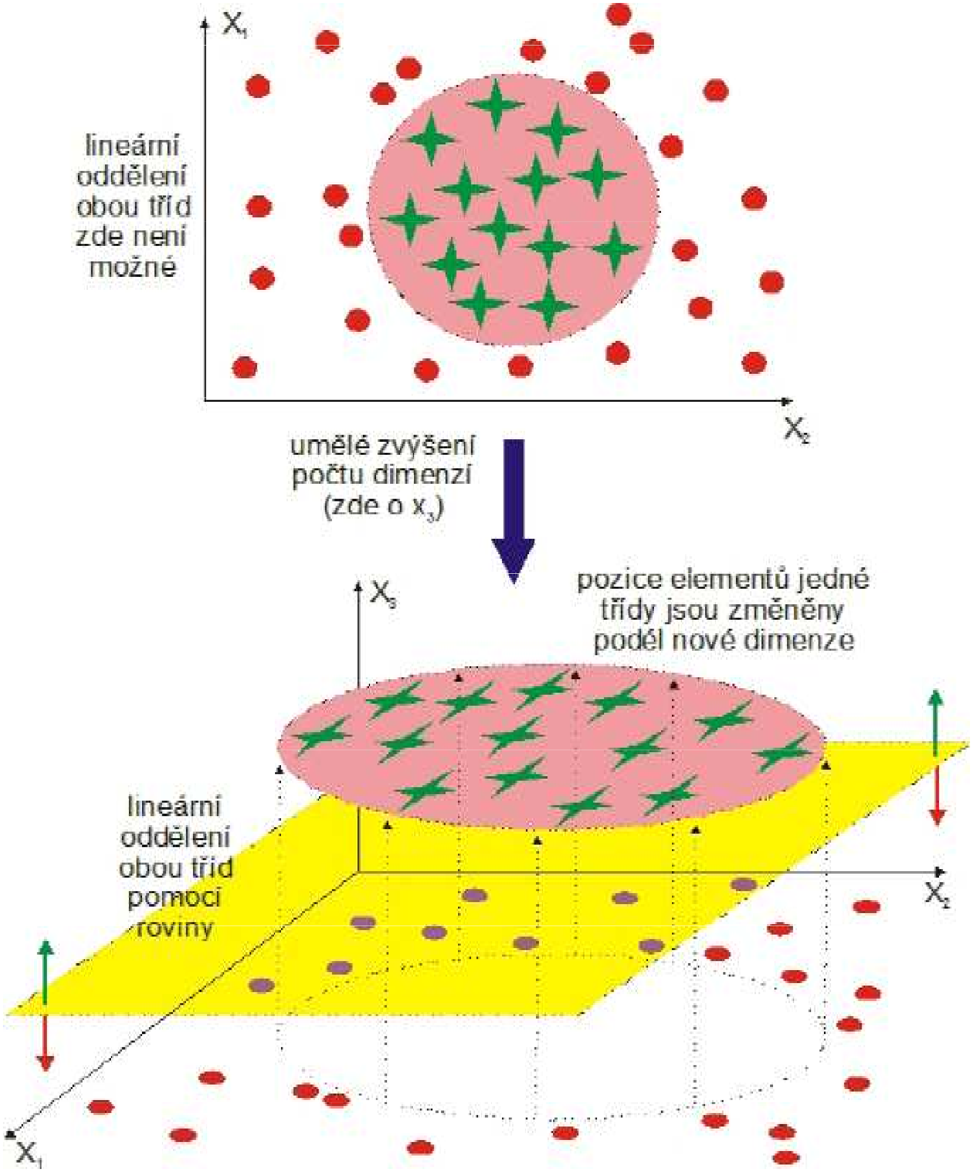
$$C - \mu_i - \lambda_i = 0,$$

$$\mu_i \geq 0,\ \lambda_i \geq 0,\ i = 1, 2, \ldots, n;$$

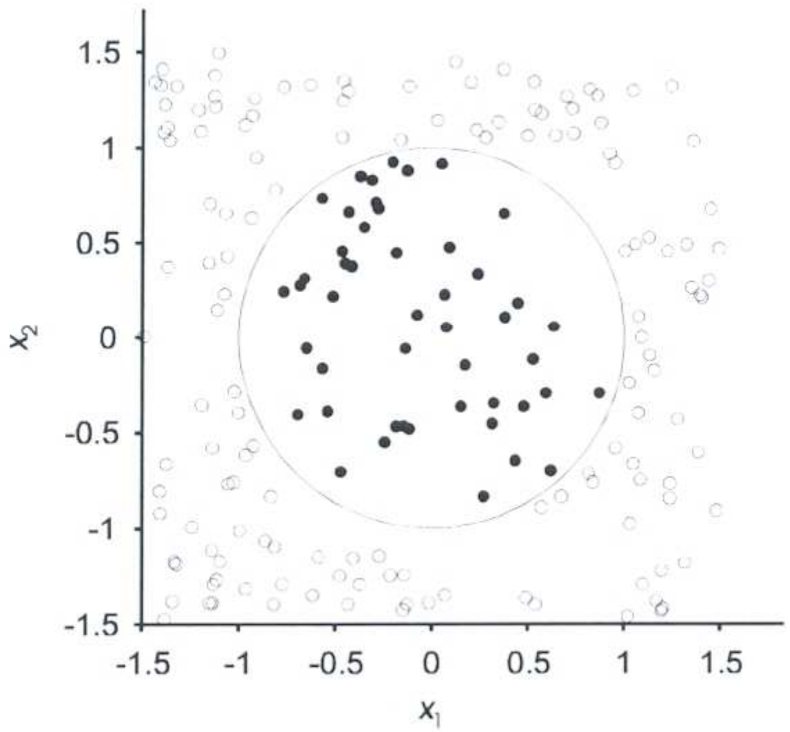
ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ

- Důležitou součástí techniky Support vector machines je jádrová transformace (angl. kernel transformation) prostoru příznaků dat do prostoru transformovaných příznaků typicky vyšší dimenze. Tato jádrová transformace umožňuje převést původně lineárně neseparovatelnou úlohu na úlohu lineárně separovatelnou, na kterou lze dále aplikovat optimalizační algoritmus pro nalezení rozdělující nadroviny.
- Používají se různé jádrové transformace. Intuitivně, vyjadřují podobnost dat, tj. svých dvou vstupních argumentů.
- Výhodou této metody (a jiných metod založených na jádrové transformaci) je, že transformace se dá definovat pro různé typy objektů, nejen body v R^n. Např. pro grafy, stromy, posloupnosti DNA ...

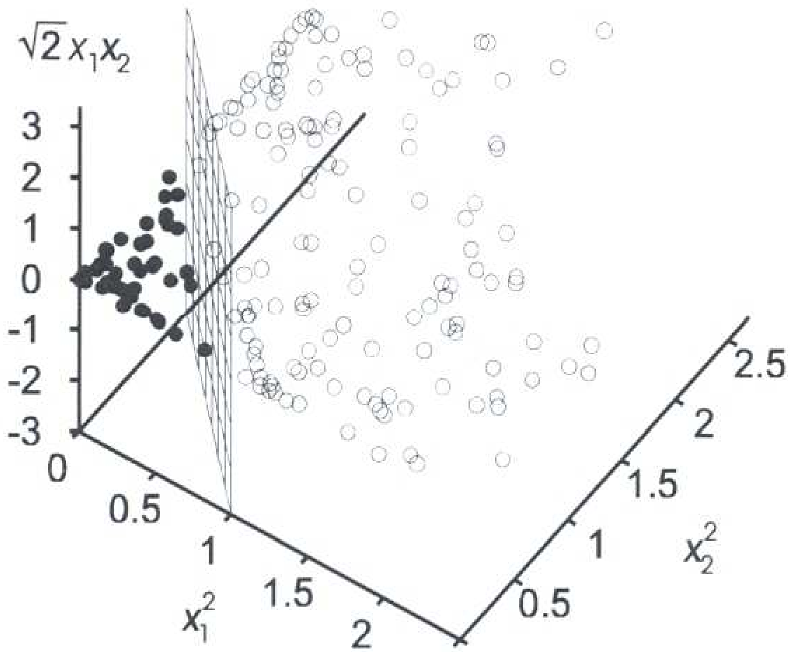
ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ



ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ



dvourozměrný prostor s oddělovací hranicí ve tvaru $x_1^2 + x_2^2 \leq 1$



tatáž situace zobrazená do trojrozměrného prostoru $(x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1x_2)$ – **kruhová hranice se stane lineární**

ALGORITMUS PODPŮRNÝCH VEKTORŮ
VÍCE KLASIFIKAČNÍCH TŘÍD

- přímé rozšíření řešení případu dichotomického problému podle schématu
  - „jedna versus zbytek" – M dichotomických úloh; každý klasifikátor je trénován podle schématu s hraniční funkcí $y_i(\mathbf{x})>0$ pro obrazy z ω_i a $y_i(\mathbf{x})<0$ pro všechny ostatní;
  - „jedna versus jedna" – M(M-1)/2 binárních klasifikátorů
  - klasifikační schéma používající K binárních klasifikátorů, přičemž jednotlivé shluky obrazů z jednotlivých tříd jsou stanoveny navrhovatelem a jsou kódovány vektory o délce K, jehož hodnoty jsou +1 nebo -1.
    např. pro M=4 a K=6 může být taková matice

$$\begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & -1 & -1 & +1 \\ -1 & -1 & +1 & -1 & +1 & +1 \end{bmatrix}$$

Příprava nových učebních materiálů pro obor Matematická biologie

je podporována projektem ESF

č. CZ.1.07/2.2.00/07.0318

„VÍCEOBOROVÁ INOVACE STUDIA MATEMATICKÉ BIOLOGIE"

EVROPSKÁ UNIE

MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ