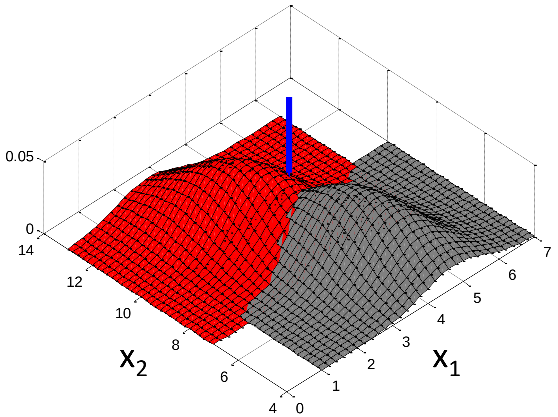
Analýza a klasifikace dat – přednáška 5

RNDr. Eva Koriťáková, Ph.D.

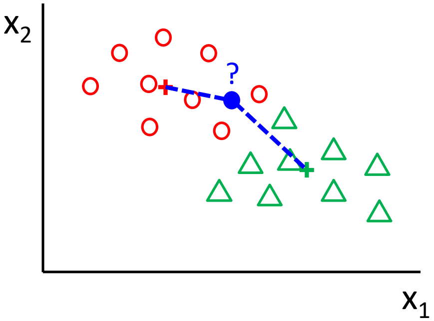
Podzim 2018

Typy klasifikátorů – podle principu klasifikace

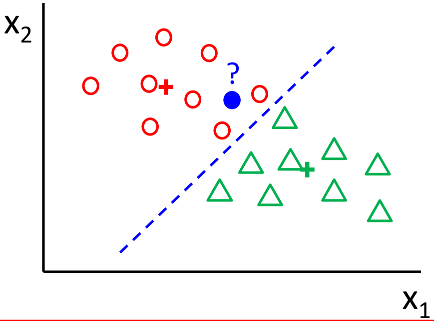
- **klasifikace pomocí diskriminačních funkcí:**
  - diskriminační funkce určují míru příslušnosti k dané klasifikační třídě
  - pro danou třídu má daná diskriminační funkce nejvyšší hodnotu



- **klasifikace pomocí vzdálenosti od etalonů klasif. tříd:**
  - etalon = reprezentativní objekt(y) klasifikační třídy
  - počet etalonů klasif. třídy různý – od jednoho vzorku (např. centroidu) po úplný výčet všech objektů dané třídy (např. u klasif. pomocí metody průměrné vazby)

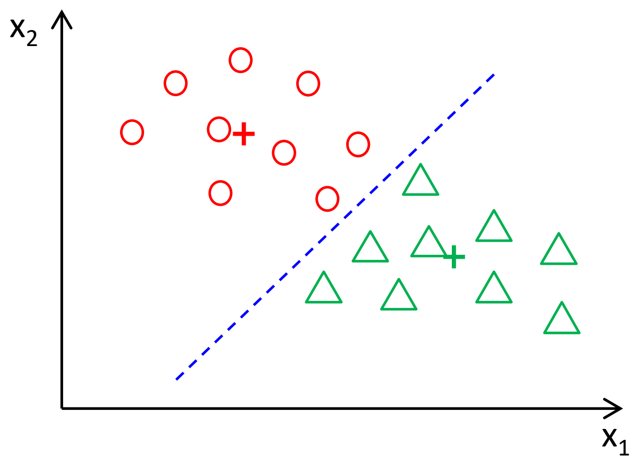


- **klasifikace pomocí hranic v obrazovém prostoru:**
  - stanovení hranic (hraničních ploch) oddělujících klasifikační třídy

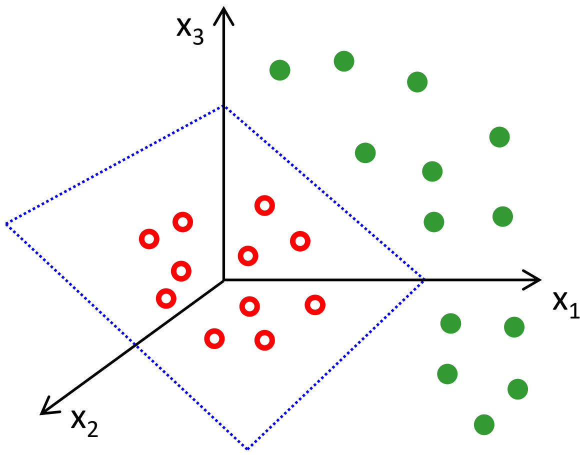


Motivace

2-rozměrný prostor



3-rozměrný prostor



Hranice je nadplocha o rozměru o jedna menší než je rozměr prostoru

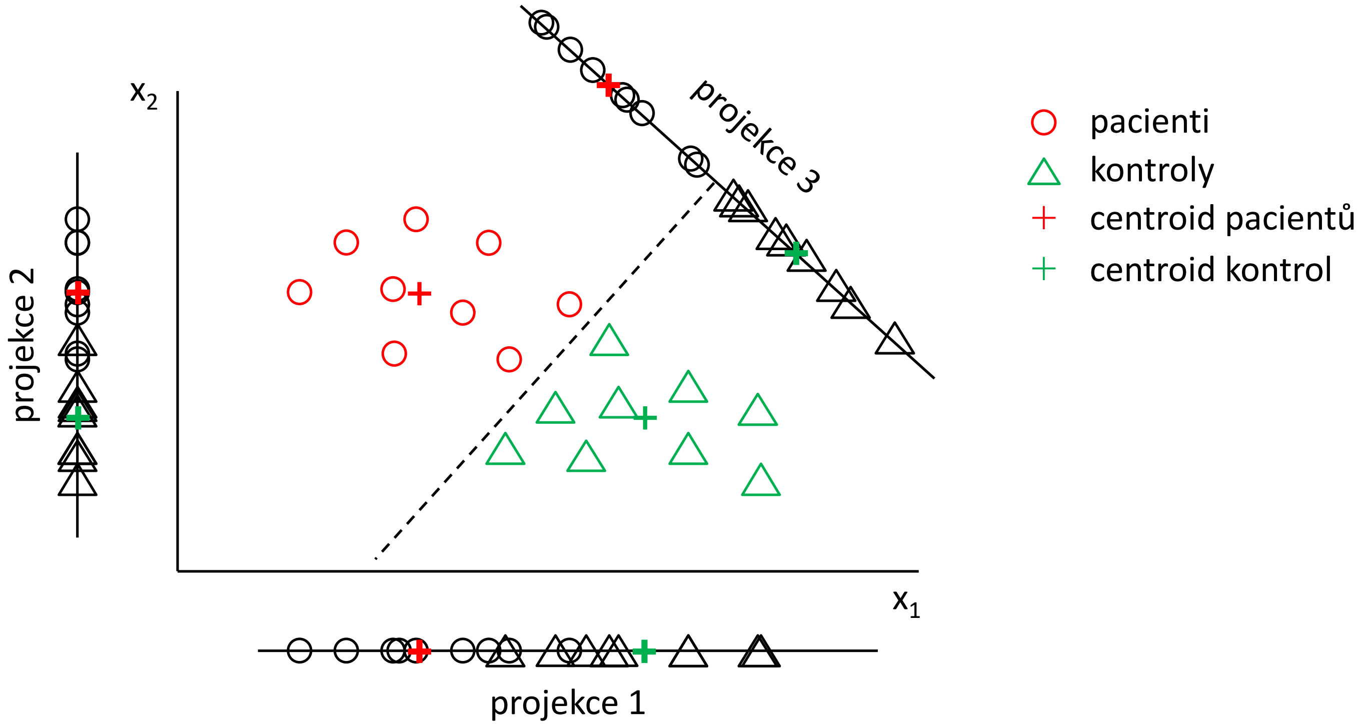
- ve 2-rozměrném prostoru je hranicí křivka (v lineárním případě přímka)
- v 3-rozměrném prostoru plocha (v lineárním případě rovina)

Hranice je tedy dána rovnicí: $\mathrm{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + \mathrm{w}_0 = 0$

Výpočet hranice různými metodami (např. Fisherova LDA, SVM apod. – viz dále)

Fisherova lineární diskriminace (FLDA)

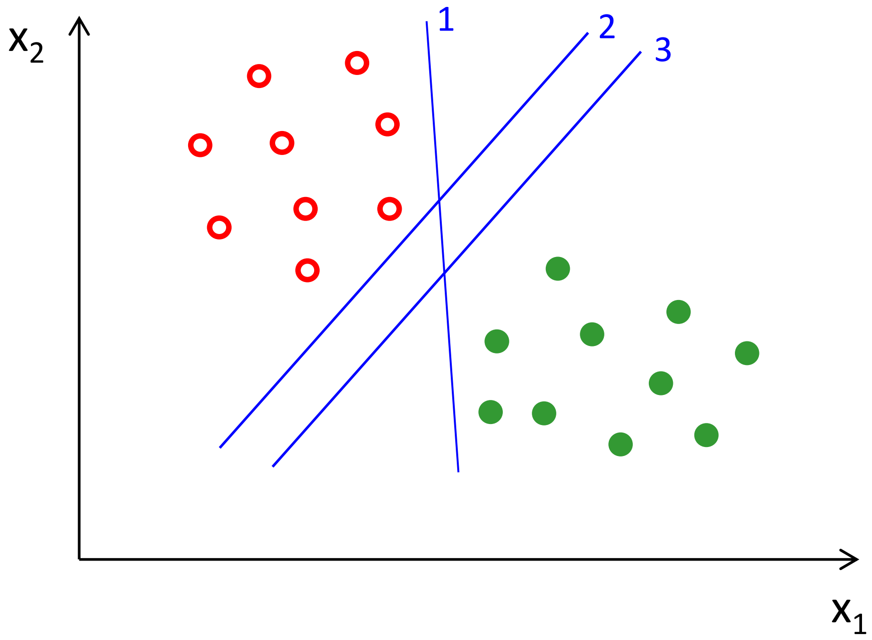
- použití pro lineární klasifikaci
- **princip:** transformace do jednorozměrného prostoru tak, aby se třídy od sebe maximálně oddělily (maximalizace vzdálenosti skupin a minimalizace variability uvnitř skupin)



- **předpoklad:** vícerozměrné normální rozdělení u jednotlivých skupin

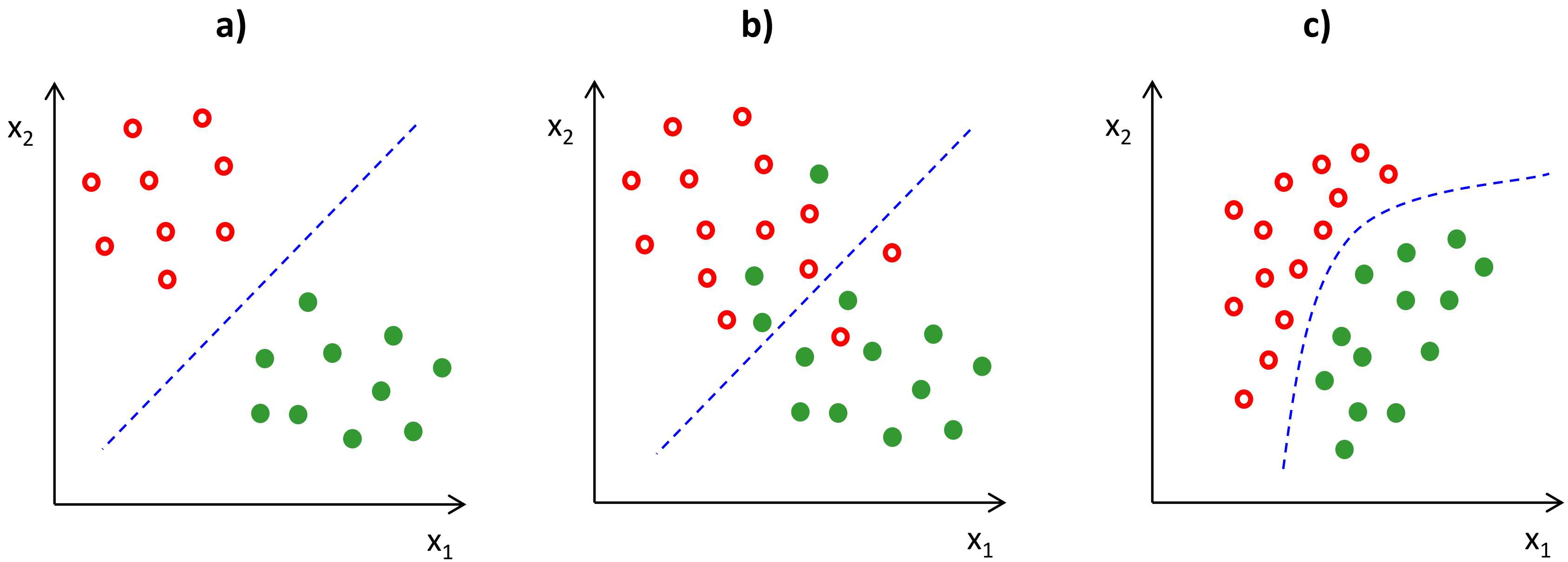
Metoda podpůrných vektorů (SVM)

- použití pro lineární i nelineární klasifikaci
- **princip:** proložení klasifikační hranice (nadroviny) tak, aby byla v co největší vzdálenosti od subjektů z obou tříd



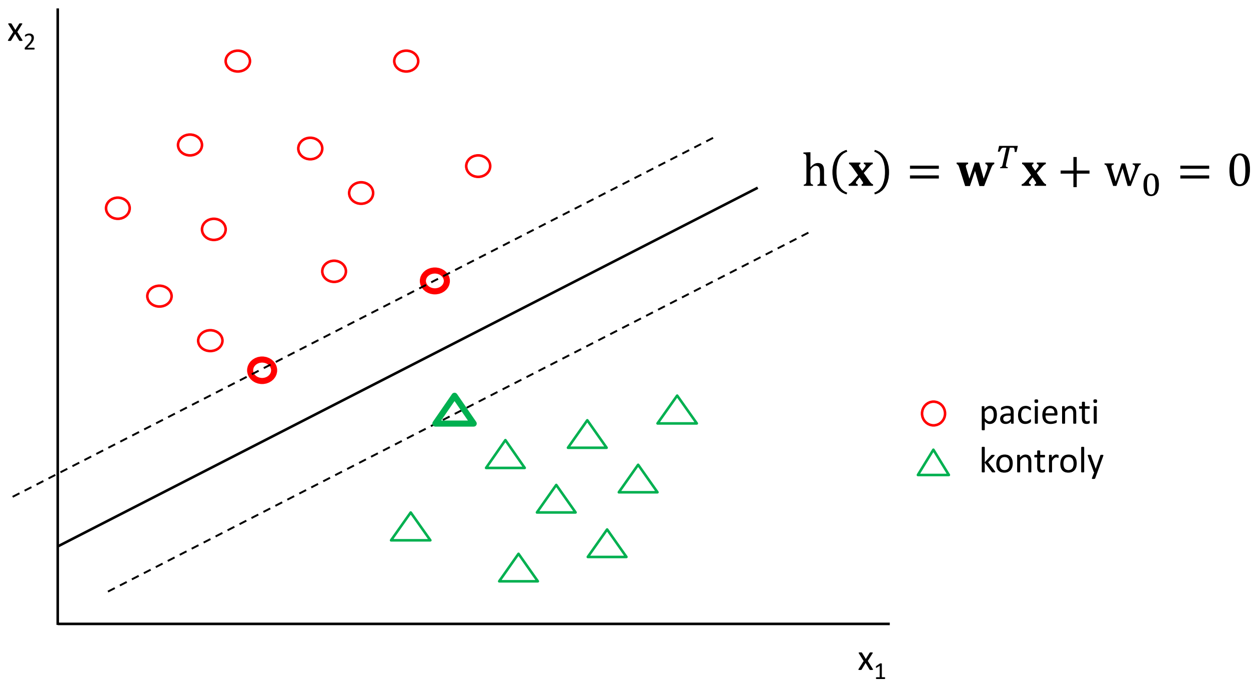
- **výhoda oproti FLDA:** nemá předpoklady o rozdělení dat
- **nevýhoda:** vyžaduje stanovení parametrů (např. C) a případně i typu jádra

Metoda podpůrných vektorů (SVM) - varianty



- varianty SVM dle typu vstupních dat:
  a) lineární verze metody podpůrných vektorů pro lineárně separabilní třídy (anglicky *maximal margin classifier*)
  b) lineární verze metody podpůrných vektorů pro lineárně neseparabilní třídy (anglicky *support vector classifier*)
  c) nelineární verze metody podpůrných vektorů (anglicky *support vector machine*)

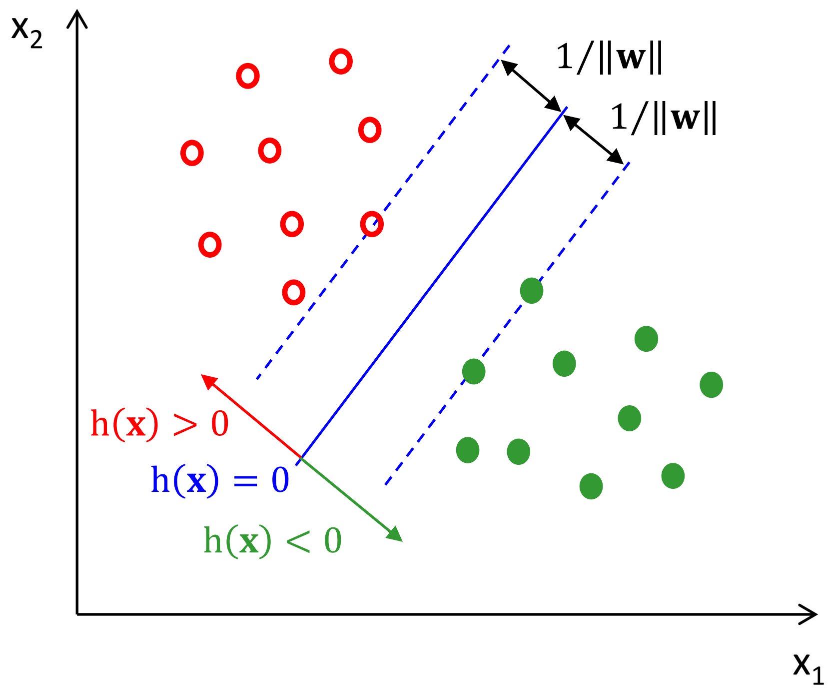
Lineární SVM – lineárně separabilní třídy



- proložení klasifikační hranice (nadroviny) tak, aby byla v co největší vzdálenosti od subjektů z obou tříd → tzn. aby byl okolo hranice co nejširší pruh bez bodů
- na popis hranice (nadroviny) stačí pouze nejbližší body, kterých je obvykle málo a nazývají se **podpůrné vektory** (support vectors)

Lineární SVM – lineárně separabilní třídy

- hranice: $\mathrm{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + \mathrm{w}_0 = 0$ (kde $\mathbf{w}$ a w_0 je orientace a poloha hranice)
- klasifikace subjektu $\mathbf{x}$ do třídy ω_D, resp. ω_H, bude dána tím, jestli je výraz $\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0$ větší, resp. menší, než 0
- vzdálenost jakéhokoliv bodu od klasifikační hranice je: $d = \frac{|\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+w_0|}{\|\mathbf{w}\|}$, kde $\|\mathbf{w}\|$ je velikost vektoru $\mathbf{w}$
- pro nejbližší bod $\mathbf{x}_i$ ze třídy ω_D zvolíme hodnotu výrazu $\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_\mathrm{i} + w_0$ rovnu $+1$
- pro nejbližší bod $\mathbf{x}_j$ ze třídy ω_H zvolíme hodnota výrazu $\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_\mathrm{j} + w_0$ rovnu -1
- pak na každé straně od dělící přímky máme toleranční pásmo o šířce $\frac{1}{\|\mathbf{w}\|}$, ve kterém se nenachází žádný bod



Lineární SVM – lineárně separabilní třídy

- Pro všechny body z trénovací množiny platí:

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0 \geq 1 \quad \text{pro všechna } \mathbf{x} \text{ z } \omega_D,$$
$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0 \leq -1 \quad \text{pro všechna } \mathbf{x} \text{ z } \omega_H,$$

- což můžeme stručněji zapsat jako

$$\boxed{\delta_{x_k}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_k + w_0\right) \geq 1, \text{pro k=1, …, N,}}$$

- kde $\delta_{x_k} = 1$ pro $\mathbf{x}_k$ ze třídy ω_D a $\delta_{x_k} = -1$ pro $\mathbf{x}_k$ ze třídy ω_H
- hledáme takové hodnoty $\mathbf{w}$ a w_0, aby byla celková šířka tolerančního pásma $\frac{1}{\|\mathbf{w}\|} + \frac{1}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$ co největší
- hledat maximum funkce $\frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$ je to stejné, jako hledat minimum funkce $\frac{\|\mathbf{w}\|}{2}$ a toto minimum se nezmění, když kladnou hodnotu v čitateli umocníme na druhou (což nám zjednoduší výpočty), takže dostáváme následující kriteriální funkci, jejíž hodnotu se snažíme minimalizovat:

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

→ řešení pomocí metody Lagrangeových součinitelů

Lineární SVM – metoda Lagrangeova součinitele

- Chceme minimalizovat výraz $J(\mathbf{w}, w_0) = \frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2}$ za podmínek $\delta_{x_k}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_k + w_0\right) \geq 1$
- Zavedeme vektor Lagrangeových součinitelů $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N]$, kde $\lambda_k \geq 0$ a pomocí nich vyjádříme optimalizovanou funkci jako:

$$L(\mathbf{w}, w_0, \boldsymbol{\lambda}) = \frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2} - \sum_{k=1}^{N} \lambda_k \left[\delta_{x_k}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_k + w_0\right) - 1\right]$$

za podmínek $\lambda_k\left[\delta_{x_k}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_k + w_0\right) - 1\right] = 0, k = 1,2, \dots, N$

- tuto Lagrangeovu funkci zderivujeme podle proměnných $\mathbf{w}$ a w_0 a derivace položíme rovny nule → po dalších úpravách dostaneme soustavu nelin. rovnic:

$$\boxed{\mathbf{w} = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k \delta_{x_k} \mathbf{x}_k}$$

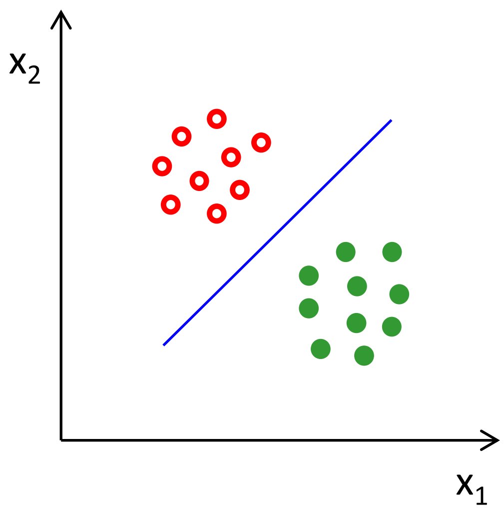
$$\sum_{k=1}^{N} \lambda_k \delta_{x_k} = 0$$

→ patrné, že pro výpočet orientace hranice důležité jen ty body, pro které platí $\lambda_k > 0$

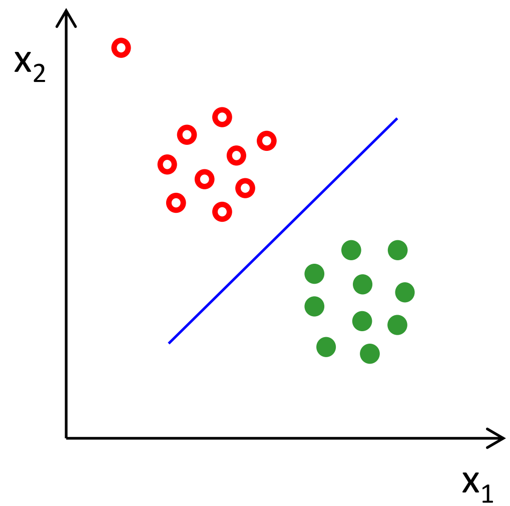
→ každý takový bod musí splňovat podmínku výše, tedy $\delta_{x_k}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_k + w_0\right) - 1 = 0$ → tedy musí ležet přesně na hranici tolerančního pásma

→ takovým bodům říkáme podpůrné vektory a jen na nich závisí umístění a orientace dělící přímky

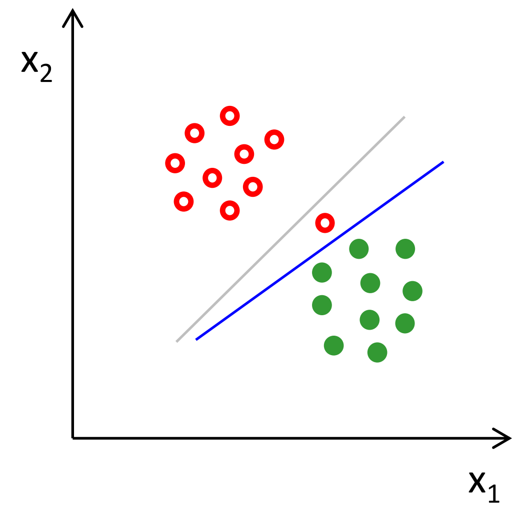
Lineární SVM – vliv odlehlých hodnot



klasifikace v případě dat neobsahujících odlehlé hodnoty



klasifikace v případě odlehlé hodnoty, která není podpůrným vektorem (poloha klasifikační hranice se nezmění)



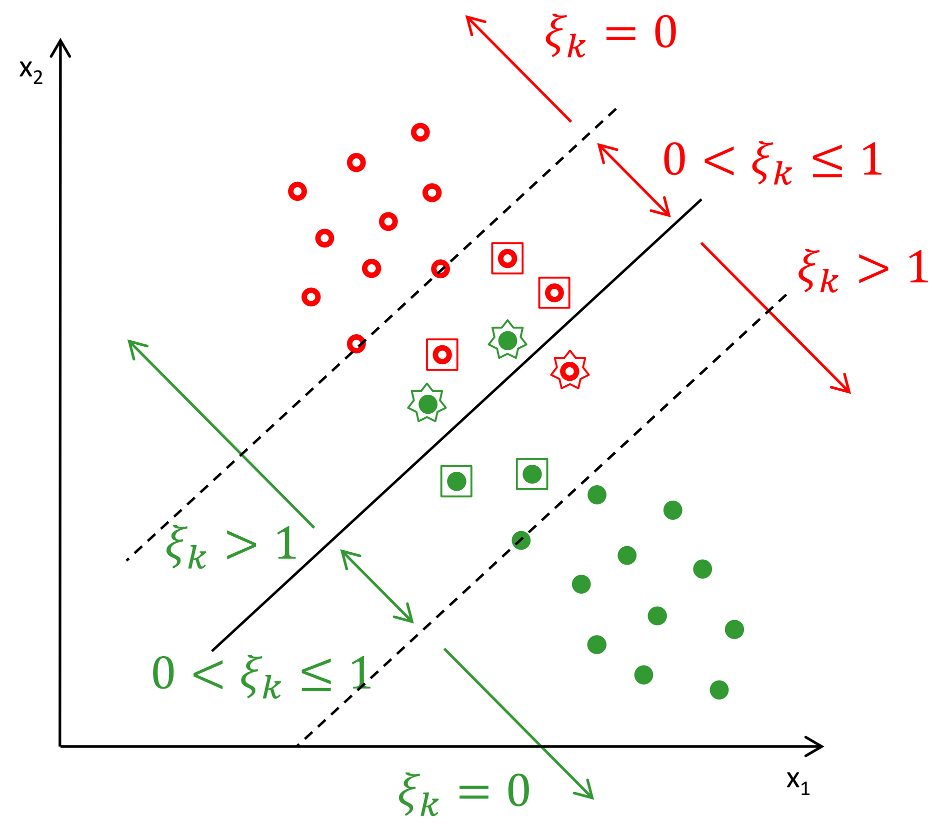
klasifikace v případě odlehlé hodnoty, která je podpůrným vektorem (poloha hranice se změní)

→ lepší použít lineární SVM pro lineárně neseparabilní třídy, kterou tato odlehlá hodnota téměř neovlivní

Lineární SVM – lineárně neseparabilní třídy

- zavedeme relaxační proměnné $\xi_k \geq 0$ vyjadřující, jak moc každý bod porušuje podmínku $\delta_{x_k}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_k + w_0\right) \geq 1$
- 3 situace:
  1. objekt leží **vně** pásma a je **správně** klasifikován: $\xi_k = 0$
  2. objekt leží **uvnitř** pásma a je **správně** klasifikován (body s čtverečky): $0 < \xi_k \leq 1$
  3. objekt leží na **opačné straně** hranice a je **chybně** klasifikován (body s hvězdičkami): $\xi_k > 1$
- podmínky jsou pak ve tvaru:

$$\boxed{\delta_{x_k}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_k + w_0\right) \geq 1 - \xi_k}$$



Lineární SVM – lineárně neseparabilní třídy

- když chceme najít hranici poskytující co nejrobustnější klasifikaci, musíme se snažit:
  - maximalizovat šířku tolerančního pásma
  - minimalizovat počet subjektů z trénovací množiny, které leží v tolerančním pásmu nebo jsou dokonce špatně klasifikovány (tj. těch, pro které $\xi_k > 0$)

- to můžeme vyjádřit jako minimalizaci kriteriální funkce:

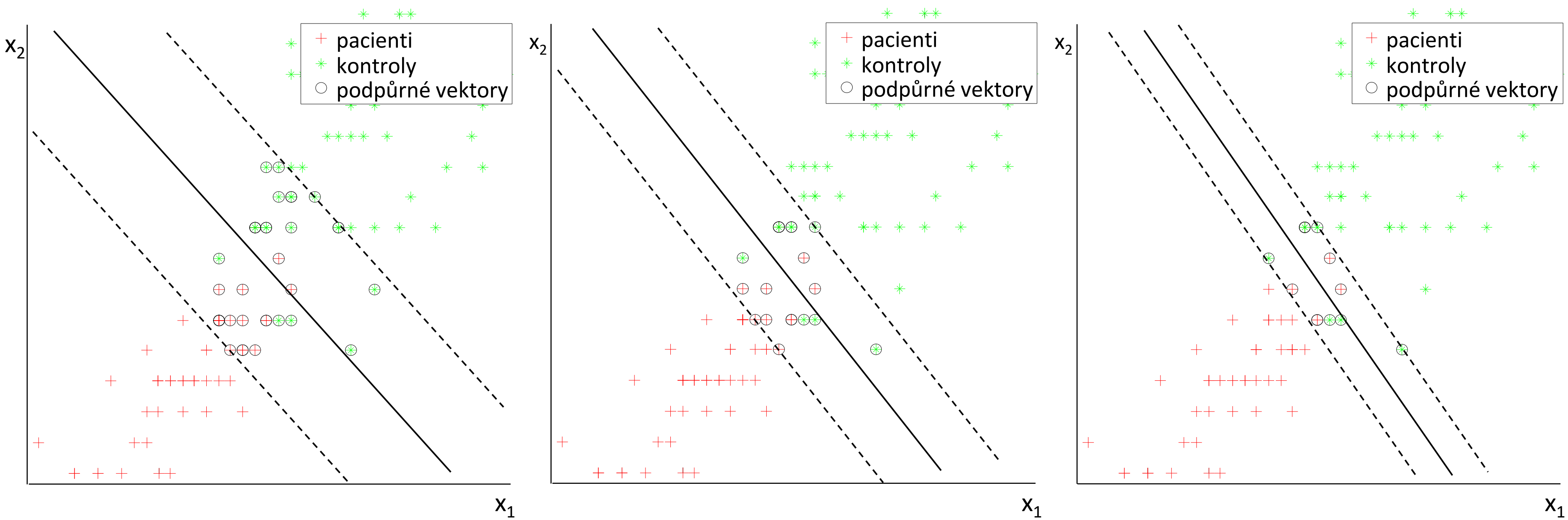
$$\boxed{\mathrm{J}(\mathbf{w}, w_0, \boldsymbol{\xi}) = \frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2} + C\sum_{k=1}^{N}\xi_k}$$

- kde C vyjadřuje poměr vlivu obou členů kriteriální funkce:
  - **pro nízké hodnoty C** bude toleranční pásmo širší a počet trénovaních subjektů v tolerančním pásmu a počet chybně klasifikovaných trénovacích subjektů bude vyšší
  - **pro vysoké hodnoty C** bude toleranční pásmo užší, ale počet trénovaních subjektů v tolerančním pásmu a počet chybně klasifikovaných trénovacích subjektů bude nižší

- řešíme opět pomocí metody Lagrangeova součinitele

SVM – vliv parametru C

$C = 0.1$ **$C = 1$** **$C = 10$**



- **pro nízké hodnoty C –** toleranční pásmo širší, ale počet trénovaních subjektů v tolerančním pásmu a počet chybně klasifikovaných trénovacích subjektů vyšší
- **pro vysoké hodnoty C –** toleranční pásmo užší, ale počet trénovaních subjektů v tolerančním pásmu a počet chybně klasifikovaných trénovacích subjektů nižší
- zpravidla nevíme, jaká hodnota parametru C pro data nejvhodnější → volba C podle křížové validace

Lineární SVM – metoda Lagrangeova součinitele

- Chceme minimalizovat $J(\mathbf{w}, w_0) = \frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2} + C\sum_{k=1}^{N} \xi_k$ za podmínek $\delta_{x_k}(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_k + w_0) \geq 1 - \xi_k$

- Zavedeme vektor Lagrangeových součinitelů $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N]$, kde $\lambda_k \geq 0$, a pomocí nich vyjádříme optimalizovanou funkci jako:

$$L(\mathbf{w}, w_0, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = \frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2} + C\sum_{k=1}^{N} \xi_k - \sum_{k=1}^{N} \lambda_k \left[\delta_{x_k}(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_k + w_0) - 1 + \xi_k\right] - \sum_{k=1}^{N} \mu_k \xi_k$$

- za podmínek $\lambda_k\left[\delta_{x_k}(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_k + w_0) - 1 + \xi_k\right] = 0$ a $\mu_k \xi_k \geq 0$, pro $k = 1, \dots, N$.

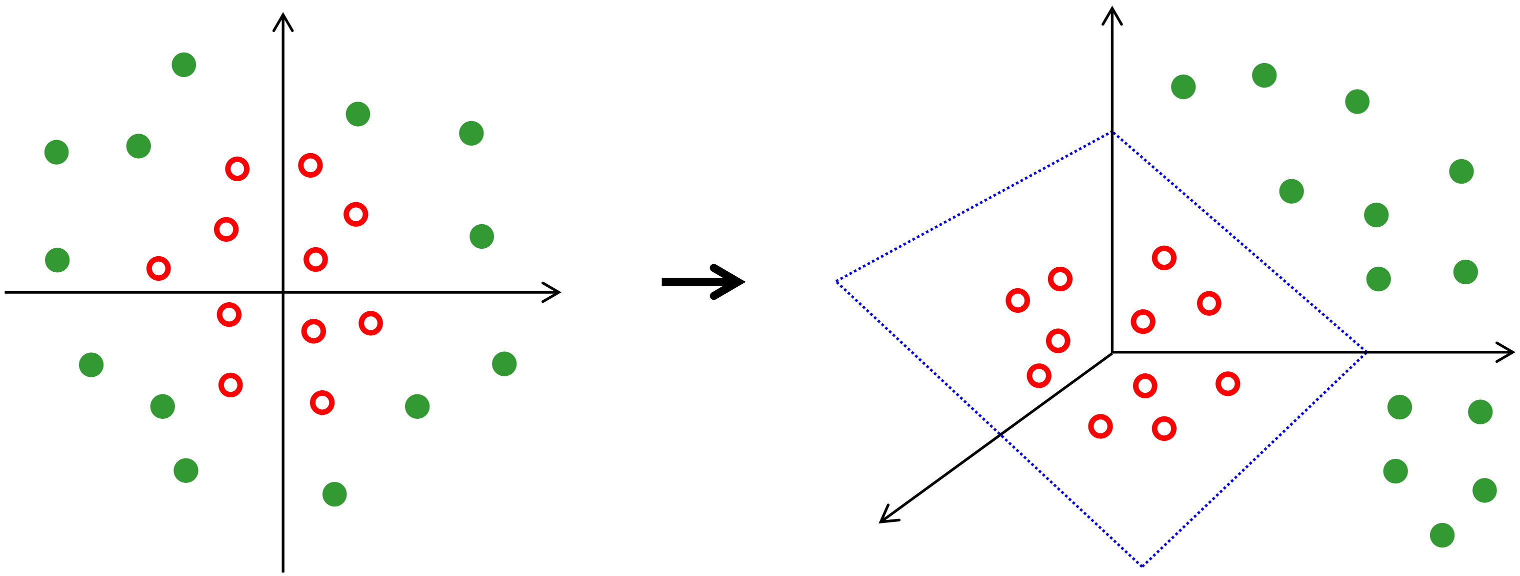
- tuto Lagrangeovu funkci zderivujeme podle proměnných $\mathbf{w}, w_0$ a $\boldsymbol{\xi}$ a derivace položíme rovny nule → po dalších úpravách dostaneme soustavu nelin. rovnic:

$$\mathbf{w} = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k \delta_{x_k} \mathbf{x}_k \qquad \left.\begin{aligned} \lambda_k + \mu_k &= C, \\ \lambda_k\left[\delta_{x_k}(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_k + w_0) - 1 + \xi_k\right] &= 0, \\ \mu_k \xi_k &= 0. \end{aligned}\right\} \text{ pro } k = 1, \dots, N$$

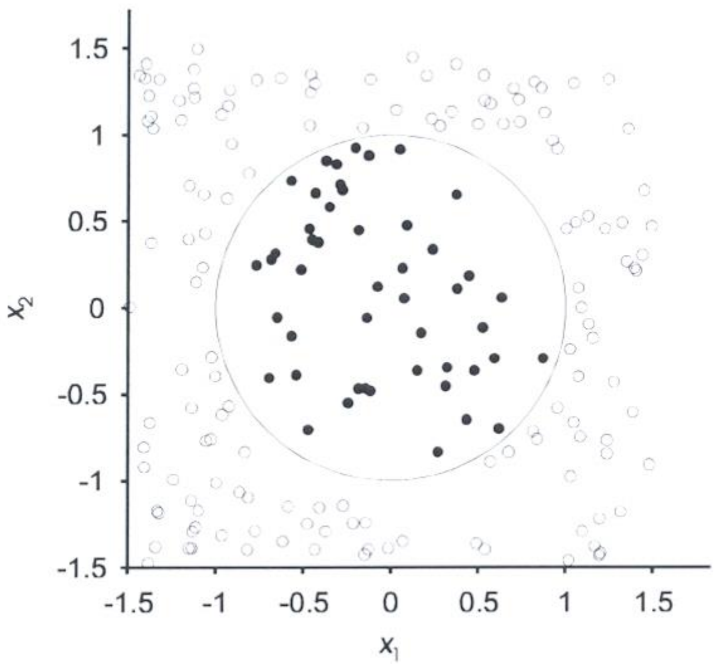
$$\sum_{k=1}^{N} \lambda_k \delta_{x_k} = 0$$

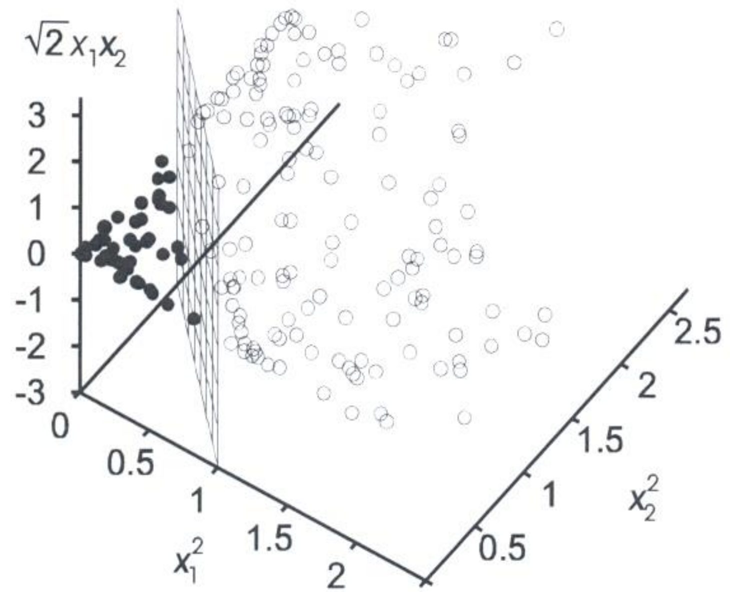
Nelineární SVM

- zobrazíme původní *p*-rozměrný obrazový prostor nelineární transformací do nového *m*-rozměrného prostoru tak, aby v novém prostoru byly klasifikační třídy lineárně separabilní



Nelineární SVM – ukázka 2

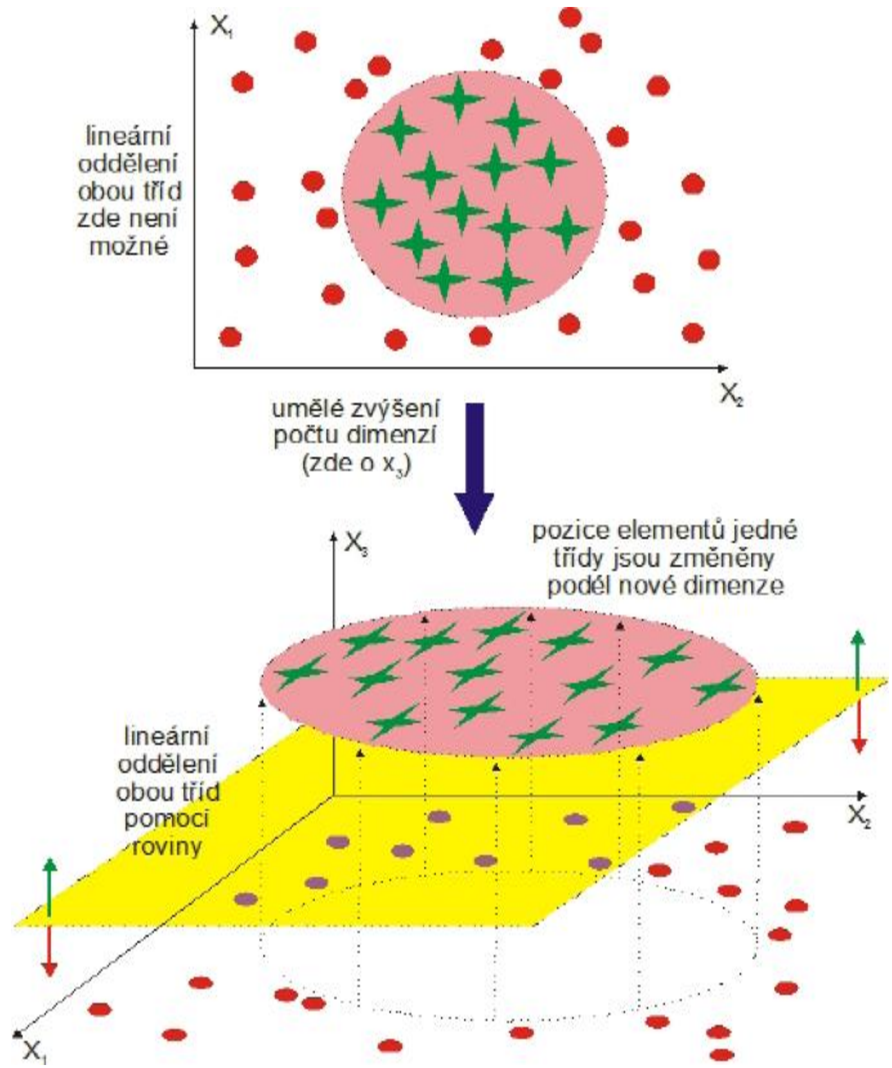




dvourozměrný prostor s oddělovací hranicí ve tvaru $x_1^2 + x_2^2 \leq 1$

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

Nelineární SVM – ukázka 3



Nelineární SVM

- transformace do nového prostoru může proběhnout navýšením počtu proměnných (např. přidáním kvadratických forem původních proměnných, tedy soubor pak bude obsahovat proměnné $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1^2, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2^2, \dots, \mathbf{x}_p, \mathbf{x}_p^2$)
- tento přístup však výpočetně náročný → použití jader (*kernels*)
- u lineárního SVM pro lineárně separabilní i neseparabilní třídy lze Lagrangeovu funkci přepsat do podoby

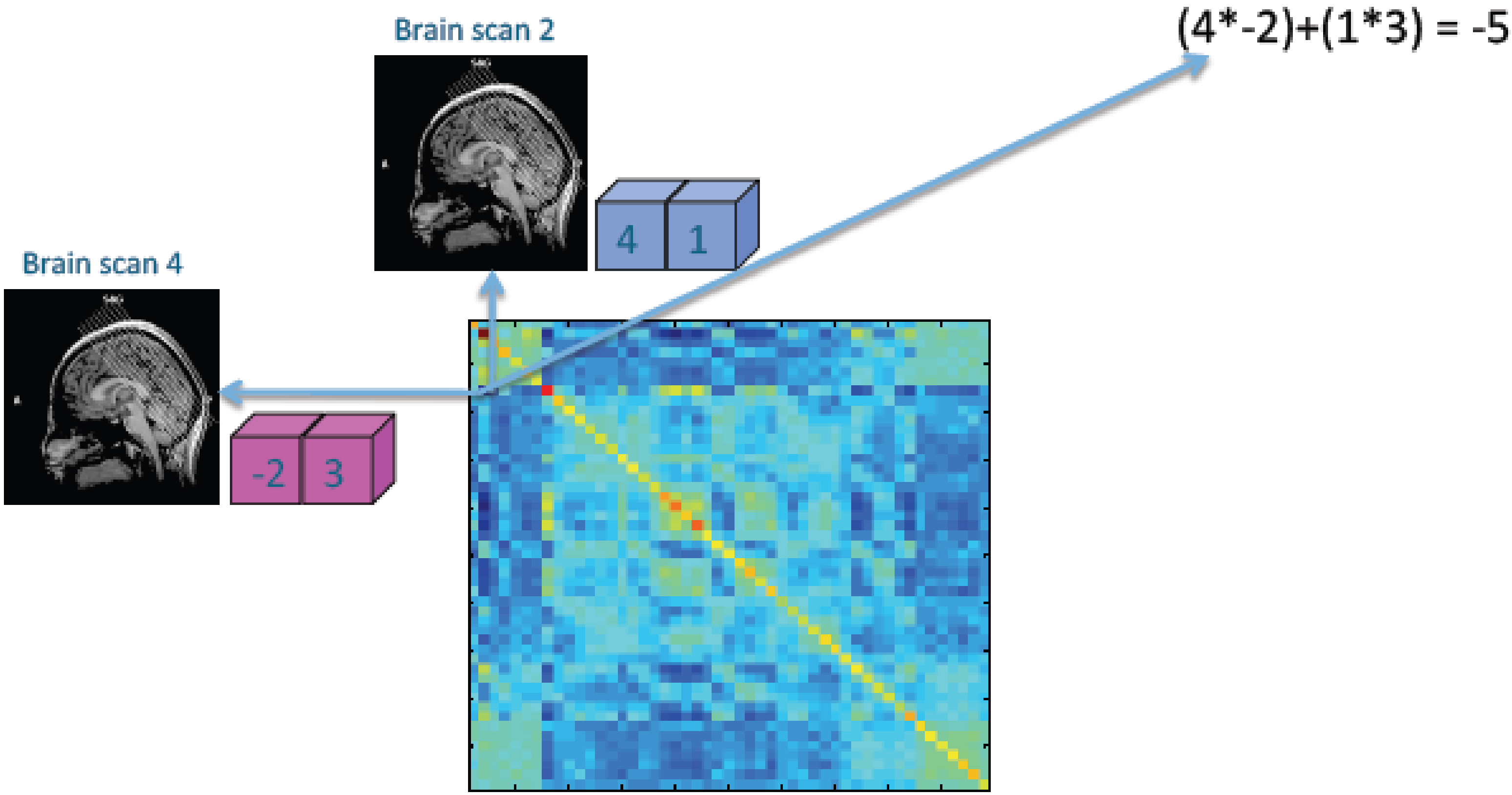
$$L(\mathbf{w}, w_0, \boldsymbol{\lambda}) = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \lambda_i \lambda_j \delta_{x_i} \delta_{x_j} \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$$

- kde si skalární součin $\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$ můžeme zapsat obecně jako $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$, kde K je nějaká funkce, kterou nazveme jádro
- typy jader:
  - lineární jádro: $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$ → lineární SVM
  - polynomiální jádro stupně *d*: $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \left(1 + \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j\right)^d = \left(1 + \sum_{l=1}^{p} \mathrm{x}_{il} \mathrm{x}_{jl}\right)^d$
  - radiální bázové jádro: $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left(-\gamma \sum_{l=1}^{p} (\mathrm{x}_{il} - \mathrm{x}_{jl})^2\right)$
  - atd.

nelineární SVM

Nelineární SVM – jádro

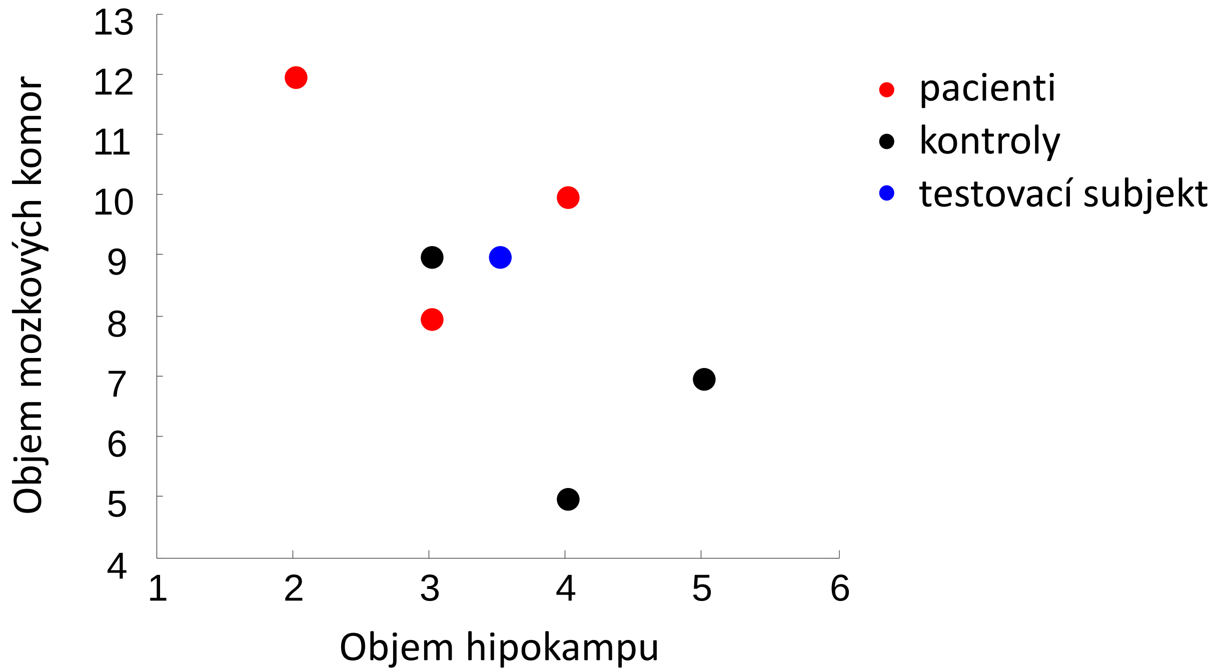
Anglicky: kernel



Příklad

Příklad: Bylo provedeno měření objemu hipokampu a mozkových komor (v cm^3) u 3 pacientů se schizofrenií a 3 kontrol: $\mathbf{X}_D = \begin{bmatrix} 2 & 12 \\ 4 & 10 \\ 3 & 8 \end{bmatrix}, \mathbf{X}_H = \begin{bmatrix} 5 & 7 \\ 3 & 9 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$.

Určete, zda testovací subjekt $\mathbf{x}_0 = [3{,}5 \quad 9]$ patří do skupiny pacientů či kontrolních subjektů pomocí metody podpůrných vektorů.



Příklad – řešení pro parametr $\boldsymbol{C} = \mathbf{1}$

- výsledkem jsou hodnoty $\boldsymbol{\lambda} = \left[0, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}, 1, 0\right]$
- podpůrnými vektory jsou tedy body $\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4$ a $\mathbf{x}_5$, protože jim příslušející $\lambda_2, \lambda_3, \lambda_4\ a\ \lambda_5$ jsou nenulové. Vypočítáme orientaci hranice:

$$\mathbf{w} = \sum_{k=1}^{6} \lambda_k \delta_{x_k} \mathbf{x}_k = \frac{1}{2}\mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_3 - \frac{1}{2}\mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_5 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 4 \\ 10 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 3 \\ 8 \end{bmatrix} - \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 5 \\ 7 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 3 \\ 9 \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} -1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}$$

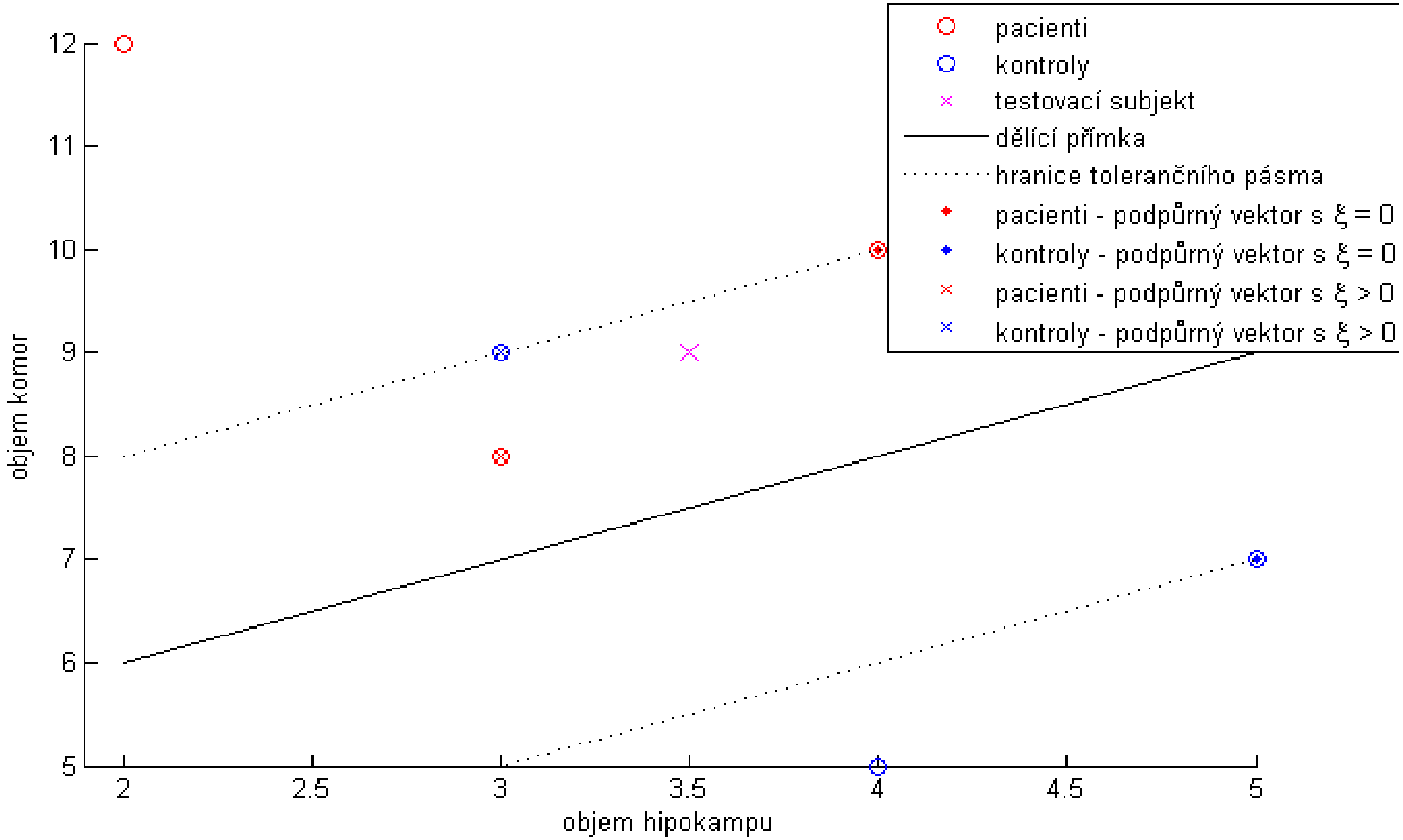
- Pokud zvolíme takové $\mathbf{x}_k$, pro které platí $0 < \lambda_k < C$, tak podle vztahu $\lambda_k + \mu_k = C$ musí být $\mu_k > 0$ a odtud podle vztahu $\mu_k \xi_k = 0$ plyne, že $\xi_k = 0$. Vzorec se tak zjednoduší na $\delta_{x_k}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_k + w_0\right) = 1$. Tedy například pro $\mathbf{x}_2$ $(0 < \lambda_2 = \frac{1}{2} < C = 1)$:

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_2 + w_0 = 1 \;\Rightarrow\; w_0 = 1 - \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 4 \\ 10 \end{bmatrix} = 1 - 3 = -2$$

- hranice je tedy dána rovnicí: $\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}\mathbf{x} - 2$

Příklad – řešení pro parametr $\boldsymbol{C} = \mathbf{1}$

- hranice je dána rovnicí: $\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}\mathbf{x} - 2$



Příklad – řešení pro parametr $\boldsymbol{C = 1}$

- můžeme klasifikovat subjekt $\mathbf{x} = [3{,}5 \quad 9]$:

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3{,}5 \\ 9 \end{bmatrix} - 2 = -1{,}75 + 4{,}5 - 2 = 0{,}75$$

- protože $0{,}75 > 0$, testovací subjekt bude zařazen do třídy pacientů
- ověříme, že natrénovaný klasifikátor zařadí subjekty z trénovací množiny tak, jak to odpovídá situaci na obrázku; tj. správně subjekty $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4$ a $\mathbf{x}_6$ a chybně subjekt $\mathbf{x}_5$:

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_{\mathbf{1}} + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 12 \end{bmatrix} - 2 = -1 + 6 - 2 = 3$$

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_{\mathbf{2}} + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 10 \end{bmatrix} - 2 = -2 + 5 - 2 = 1$$

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_{\mathbf{3}} + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 8 \end{bmatrix} - 2 = -1{,}5 + 4 - 2 = 0{,}5$$

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_{\mathbf{4}} + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \\ 7 \end{bmatrix} - 2 = -2{,}5 + 3{,}5 - 2 = -1$$

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_{\mathbf{5}} + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 9 \end{bmatrix} - 2 = -1{,}5 + 4{,}5 - 2 = 1$$

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_{\mathbf{6}} + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \end{bmatrix} - 2 = -2 + 2{,}5 - 2 = -1{,}5$$

Příklad – řešení pro parametr $\boldsymbol{C} = \mathbf{10}$

- výsledkem jsou hodnoty $\boldsymbol{\lambda} = [0, \ \ 3{,}6371, \ \ 8{,}7629, \ \ 2{,}0371, \ \ 10,$

- podpůrnými vektory jsou tedy body $\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \mathbf{x}_5$ a $\mathbf{x}_6$ **,** protože jim příslušející $\lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5 \ \ a \ \lambda_6$ jsou nenulové. Vypočítáme orientaci hranice:

$$\mathbf{w} = \sum_{k=1}^{6} \lambda_k \delta_{x_k} \mathbf{x}_k = 3{,}6371\mathbf{x}_2 + 8{,}7629\mathbf{x}_3 - 2{,}0371\mathbf{x}_4 - 10\mathbf{x}_5 - \ 0{,}3629\mathbf{x}_6$$

$$= 3{,}6371 \begin{bmatrix} 4 \\ 10 \end{bmatrix} + 8{,}7629 \begin{bmatrix} 3 \\ 8 \end{bmatrix} - 2{,}0371 \begin{bmatrix} 5 \\ 7 \end{bmatrix} - 10 \begin{bmatrix} 3 \\ 9 \end{bmatrix} - 0{,}3629 \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4/5 \\ 2/5 \end{bmatrix}$$

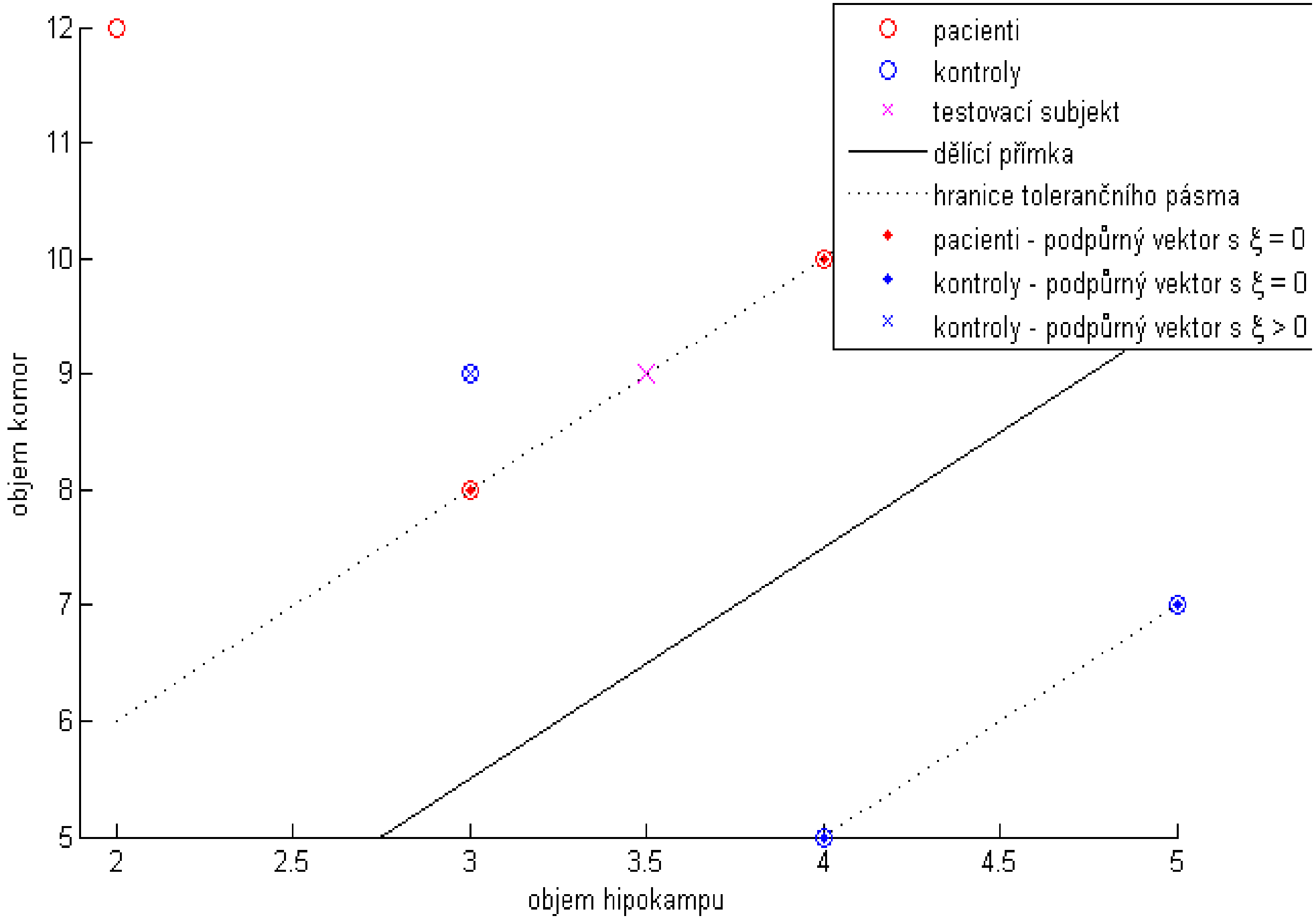
- Polohu dělící přímky určíme opět ze $\delta_{x_k}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_k + w_0\right) = 1$. Tedy například pro $\mathbf{x}_2$ $(0 < \lambda_2 = 3{,}6371 < C = 10)$**:**

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_2 + w_0 = 1 \ \ \Rightarrow \ \ w_0 = 1 - \begin{bmatrix} -\frac{4}{5} & \frac{2}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 10 \end{bmatrix} = 1 - \frac{4}{5} = \frac{1}{5}$$

- hranice je tedy dána rovnicí: $\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{4}{5} & \frac{2}{5} \end{bmatrix} \mathbf{x} + \frac{1}{5}$

Příklad – řešení pro parametr $\boldsymbol{C = 10}$

- hranice je tedy dána rovnicí: $\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{4}{5} & \frac{2}{5} \end{bmatrix}\mathbf{x} + \frac{1}{5}$



Příklad – řešení pro parametr $\boldsymbol{C = 10}$

- můžeme klasifikovat subjekt $\mathbf{x} = [3{,}5 \quad 9]$:

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{4}{5} & \frac{2}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3{,}5 \\ 9 \end{bmatrix} + \frac{1}{5} = -2{,}8 + 3{,}6 + 0{,}2 = 1$$

- protože $1 > 0$, testovací subjekt bude zařazen do třídy pacientů
- ověříme, že natrénovaný klasifikátor zařadí subjekty z trénovací množiny tak, jak to odpovídá situaci na obrázku; tj. správně subjekty $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4$ a $\mathbf{x}_6$ a chybně subjekt $\mathbf{x}_5$:

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_1 + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{4}{5} & \frac{2}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 12 \end{bmatrix} + \frac{1}{5} = -\frac{8}{5} + \frac{24}{5} + \frac{1}{5} = \frac{17}{5} = 3{,}4$$

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_2 + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{4}{5} & \frac{2}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 10 \end{bmatrix} + \frac{1}{5} = -\frac{16}{5} + \frac{20}{5} + \frac{1}{5} = \frac{5}{5} = 1$$

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_3 + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{4}{5} & \frac{2}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 8 \end{bmatrix} + \frac{1}{5} = -\frac{12}{5} + \frac{16}{5} + \frac{1}{5} = \frac{5}{5} = 1$$

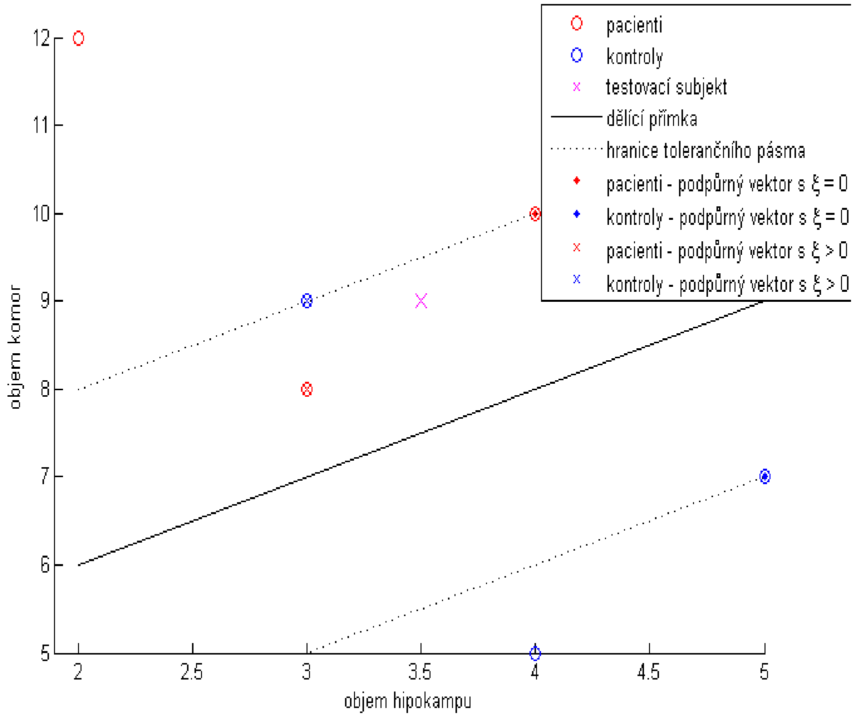
$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_4 + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{4}{5} & \frac{2}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \\ 7 \end{bmatrix} + \frac{1}{5} = -\frac{20}{5} + \frac{14}{5} + \frac{1}{5} = -\frac{5}{5} = -1$$

$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_5 + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{4}{5} & \frac{2}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 9 \end{bmatrix} + \frac{1}{5} = -\frac{12}{5} + \frac{18}{5} + \frac{1}{5} = \frac{7}{5} = 1{,}4$$

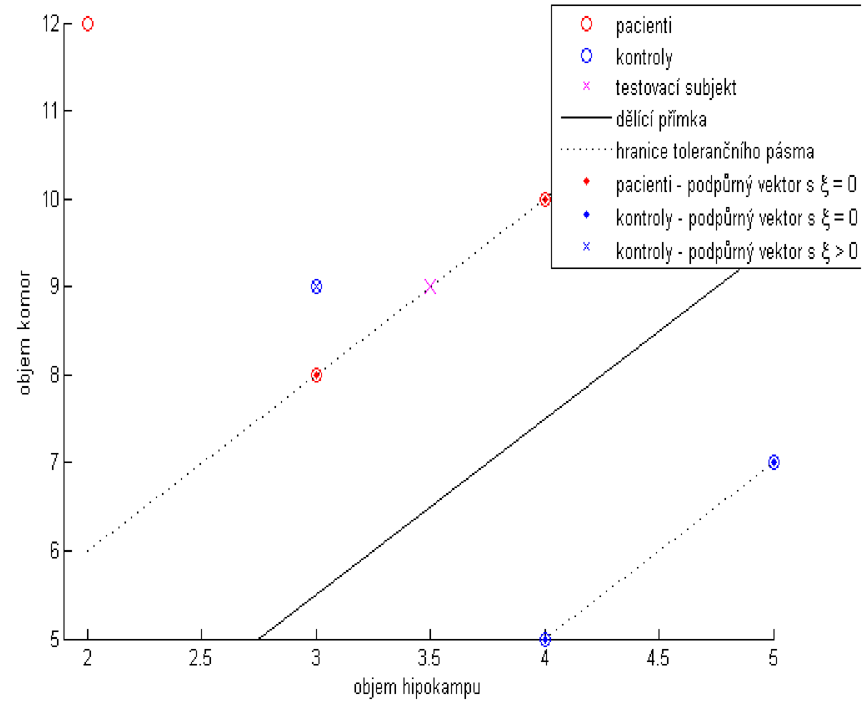
$$\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_6 + w_0 = \begin{bmatrix} -\frac{4}{5} & \frac{2}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \end{bmatrix} + \frac{1}{5} = -\frac{16}{5} + \frac{10}{5} + \frac{1}{5} = -\frac{5}{5} = -1$$

Příklad – srovnání výsledků pro $\boldsymbol{C} = \mathbf{1}$ a $\boldsymbol{C} = \mathbf{10}$

$\boldsymbol{C} = \mathbf{1}$:



$\boldsymbol{C} = \mathbf{10}$:



Detailní řešení příkladu zde:

http://portal.matematickabiologie.cz/res/file/Vicerozmerky%20-%20kap11_4%20-%20SVM%20-%20reseni%20prikladu(1).pdf

Sekvenční klasifikace

Typy klasifikátorů

1. **Podle reprezentace vstupních dat:**
   - **příznakové klasifikátory:** paralelní x sekvenční
   - **strukturální (syntaktické) klasifikátory**
   - **kombinované klasifikátory**

2. **Podle jednoznačnosti zařazení do skupin:**
   - **deterministické klasifikátory**
   - **pravděpodobnostní klasifikátory**

3. **Podle typů klasifikačních a učících algoritmů:**
   - **parametrické klasifikátory**
   - **neparametrické klasifikátory**

4. **Podle způsobu učení:**
   - **učení s učitelem:** dokonalým x nedokonalým
   - **učení bez učitele**

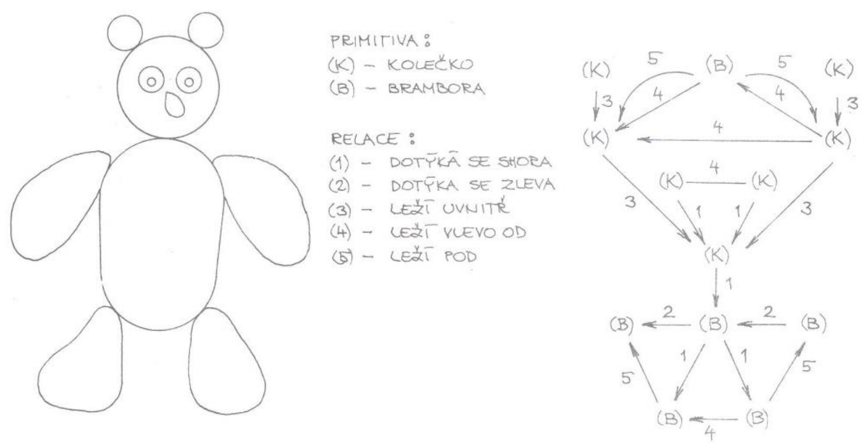
5. **Podle podle principu klasifikace:**
   - **klasifikace pomocí diskriminačních funkcí**
   - **klasifikace pomocí vzdálenosti od etalonů klasifikačních tříd**
   - **klasifikace pomocí hranic v obrazovém prostoru**

Typy klasifikátorů – podle reprezentace vstupních dat

- **příznakové** – vstupní data vyjádřena vektorem hodnot jednotlivých proměnných (příznaků):
  - paralelní – zpracování vektoru jako celku (např. Bayesův klasifikátor)
  - sekvenční – zpracování (občas i měření) proměnných postupně (např. klasifikační stromy)

	A	B	C	D	E
1	id	vek	pohlavi	vyska	vaha
2	1	38	Z	164	45
3	2	36	M	167	90
4	3	26	Z	178	70

- **strukturální (syntaktické)** – vstupní data popsána relačními strukturami



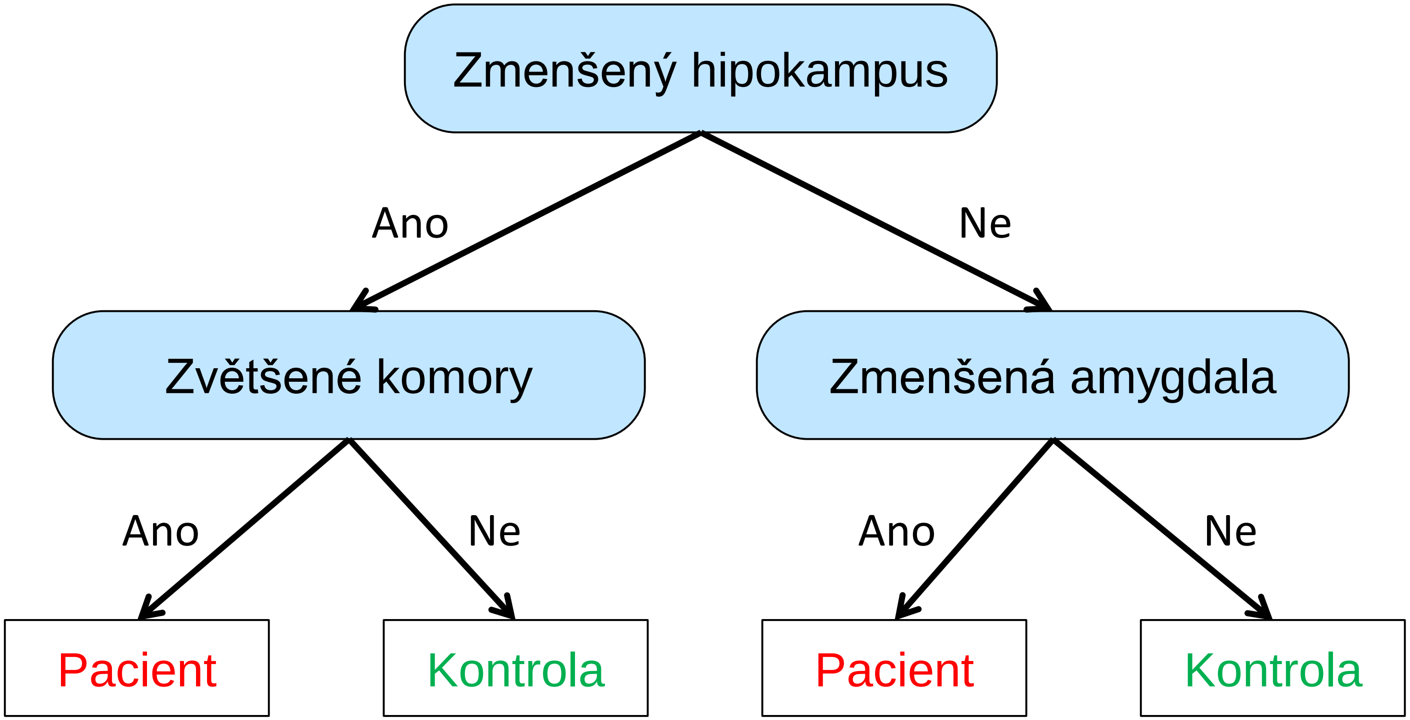
- **kombinované** – jednotlivá primitiva doplněna příznakovým popisem

Sekvenční klasifikace - motivace

- až dosud (bayesovské klasifikátory, klasifikátory s diskriminační hranicí, s minimální vzdáleností, …) – pevný konstantní počet příznaků
- kolik a jaké proměnné?
  - málo proměnných – možná chyba klasifikace
  - moc proměnných – možná nepřiměřená pracnost, vysoké náklady
  - použít proměnné, které nesou co nejvíce informace o klasifikační úloze
- **sekvenční klasifikace** – kompromis mezi velikostí klasifikační chyby a cenou určení příznaků
  - klasifikace na základě klasifikačních stromů a lesů
  - klasifikace s rostoucím počtem proměnných, přičemž okamžik ukončení klasifikační procedury stanoví klasifikátor sám podle předem daného kritéria pro kvalitu rozhodnutí (tj. na základě vlastností klasifikačních tříd, resp. objektů v nich)

Klasifikační (rozhodovací) stromy

Princip: Postupné rozdělování datasetu do skupin podle hodnot jednotlivých proměnných.

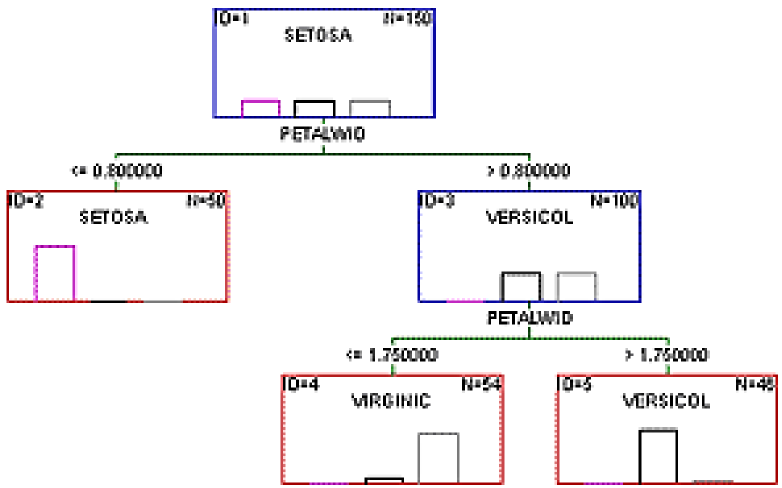


Patří mezi metody sekvenční klasifikace.

Podrobnější informace: https://www.iba.muni.cz/res/file/ucebnice/komprdova-rozhodovaci-stromy-lesy.pdf

Klasifikační (rozhodovací) stromy - doplnění

- kategoriální proměnné – rozdělení se provede podle kategorií (viz obrázek na předchozím slidu)
- spojité proměnné – nalezne se nejlepší dělící hodnota a pak dojde k rozdělení; proměnná se může použít i vícekrát s různými dělícími hodnotami



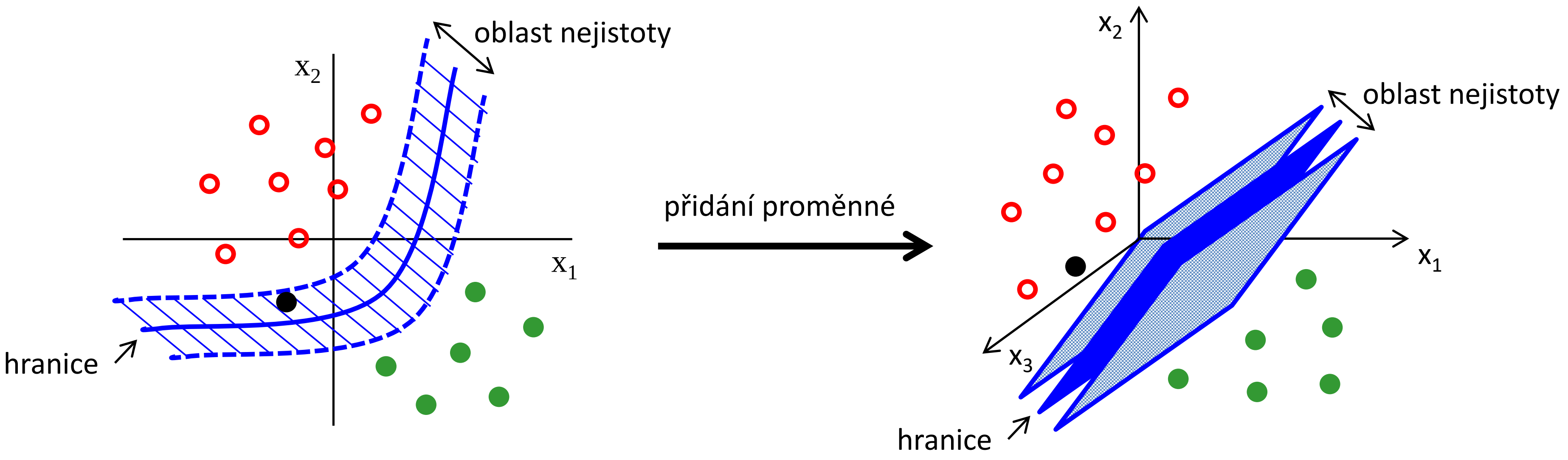
- postup vytvoření stromu:
  - nejprve se vytvoří strom, kde v „listech“ (terminálních uzlech) jsou vždy jen subjekty z jedné skupiny
  - následuje tzv. „prořezávání stromu“ – odstraní se ty uzly, které jsou nejvíce zbytečné (příliš velký strom je totiž zpravidla přeučený a funguje špatně na testovacích datech)

Klasifikační (rozhodovací) lesy

- klasifikační lesy – použití více klasifikačních stromů ke klasifikaci
- použije se zpravidla jen část dat na vytvoření (tzn. naučení) jednotlivých stromů:
  - náhodně vybrané subjekty
  - náhodně vybrané proměnné
- finální klasifikace testovacích dat se provede „hlasováním“ výsledků z klasifikace pomocí jednotlivých stromů

Klasifikace s rostoucím počtem proměnných

Princip: Seřadíme proměnné podle množství informace, které nesou, a pak opakovaně provádíme klasifikaci objektu (subjektu) s postupně se zvyšujícím počtem proměnných, dokud objekt nejsme schopni jednoznačně zařadit



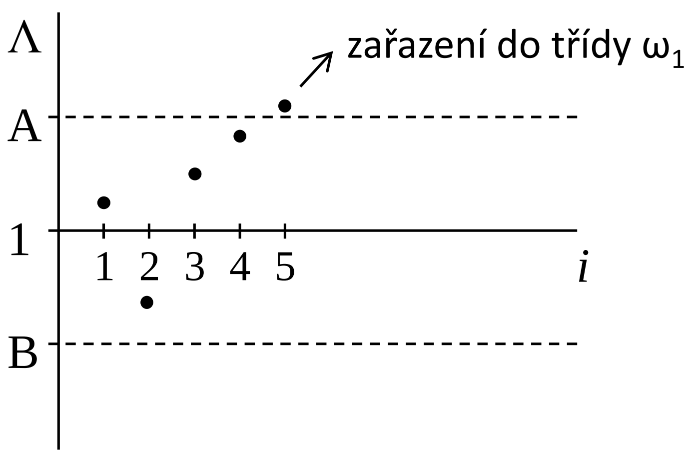
Kritéria pro řízení sekvenčního klasifikátoru:

- Waldovo kritérium
- Reedovo kritérium
- Modifikované Waldovo kritérium
- Modifikované Reedovo kritérium

Waldovo kritérium

- objekt **x** popsán množinou hodnot proměnných $\{x_1, x_2, \ldots\}$
- mějme $p(x_1, x_2, \ldots, x_i|\omega_1)$ a $p(x_1, x_2, \ldots, x_i|\omega_2)$, což jsou *i*-rozměrné hustoty pravděpodobnosti (tzn. dané prvními *i* proměnnými) výskytu objektu $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_i)$ v *i*-tém klasifikačním kroku v třídách ω_1 a ω_2
- A a B jsou konstanty ($0<B<1<A<\infty$)
- spočítáme věrohodnostní poměr: $\Lambda_i = \dfrac{p(x_1, x_2, \ldots, x_i \mid \omega_1)}{p(x_1, x_2, \ldots, x_i \mid \omega_2)}$

1. pokud je $\Lambda_i \leq B$, pak se objekt **x** zařadí do třídy ω_2 a proces se ukončí
2. pokud je $\Lambda_i \geq A$, pak se objekt **x** zařadí do třídy ω_1 a proces se ukončí
3. pokud je $\Lambda_i \in (B,A)$, přidáme další proměnnou (příznak) x_{i+1} a proces se opakuje

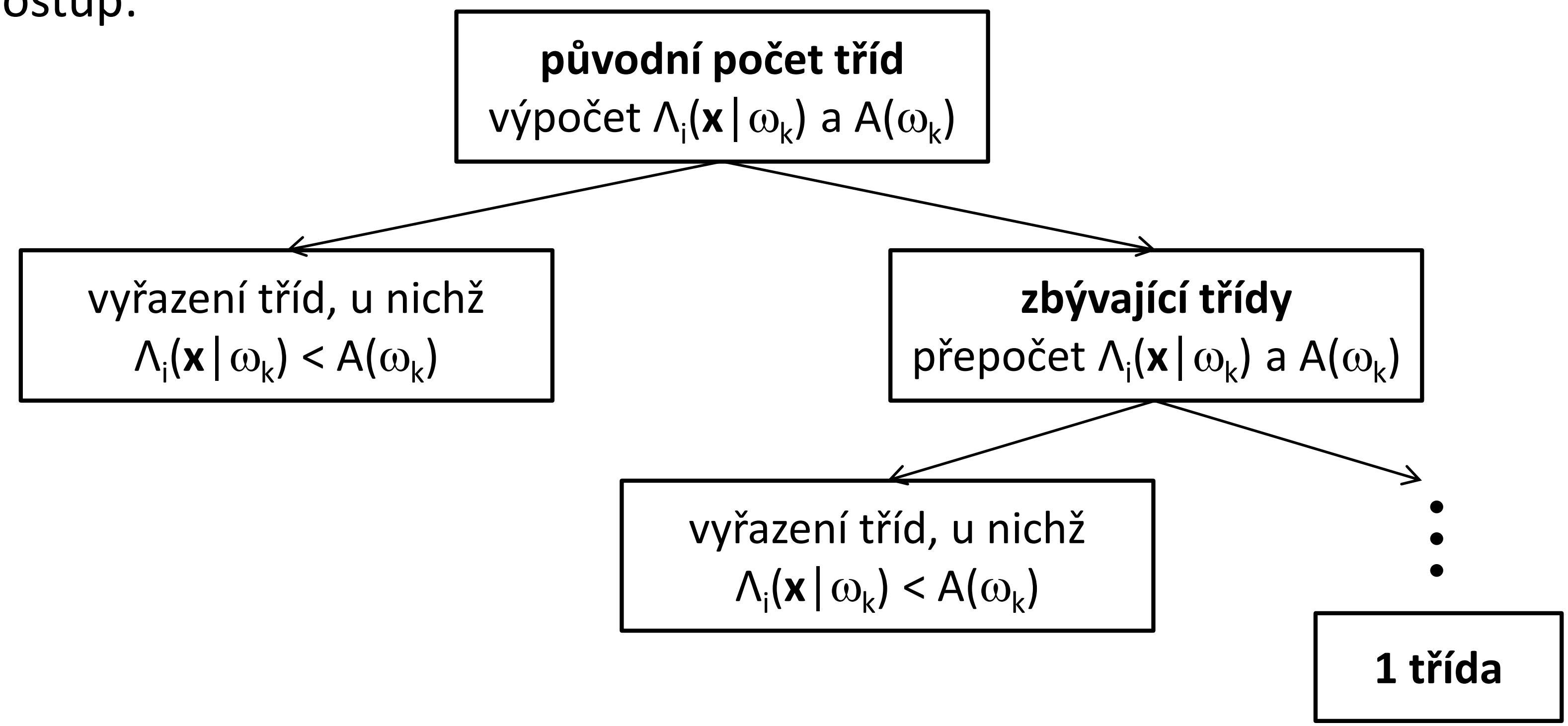


Optimální vlastnosti Waldova kritéria, protože:

- průměrný počet proměnných je menší nebo stejný jako u kritérií s pevným počtem proměnných
- průměrný počet kroků je menší než u jiných sekvenčních kritérií

Reedovo kritérium

- u více než 2 klasifikačních tříd
- založeno na výpočtu zobecněného věrohodnostního poměru pro *k*-tou třídu $\Lambda_i(\mathbf{x}|\omega_k)$ a mezní hodnoty *k*-té třídy $A(\omega_k)$
- postup:



- pokud není v některém kroku možné vyloučit žádnou třídu, zvýší se počet proměnných o 1 a proces pokračuje od začátku

Modifikované Waldovo kritérium

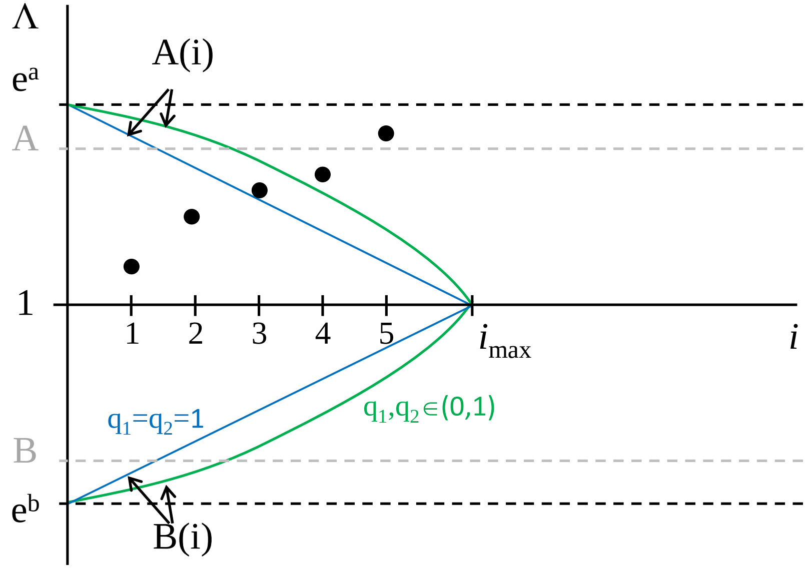
- přes optimální vlastnosti Waldova kritéria může nastat:
  - počet kroků pro některé objekty velký, i když střední hodnota nízká
  - střední hodnota počtu kroků velká, pokud chceme malé pravděpodobnosti chybných rozhodnutí

- 2 možnosti řešení:

a) po určitém počtu kroků se sekvenční výpočet přeruší a dokončí se na základě nějakého rozhodnutí vycházejícího z nějakého kritéria založeného na pevném počtu příznaků

b) zavedení proměnných hranic A(i) a B(i)

$$\text{např. } A(i) = a.\left(1 - \frac{i}{i_{\max}}\right)^{q_1} \text{ a } B(i) = -b.\left(1 - \frac{i}{i_{\max}}\right)^{q_2}$$



Modifikované Reedovo kritérium

- zobecněný věrohodnostní poměr se srovnává s prahem $G_r(i) = g_r\left(1 - \frac{i}{i_{\max}}\right)^{q_r}$
- přičemž pokud $\Lambda_i(\mathbf{x}|\omega_r) < G_r(i)$, třída ω_r vyloučena z dalšího rozhodování
- jinak je postup stejný jako u klasického Reedova kritéria

Poznámka

- nelze dopředu říci, která klasifikační metoda bude pro daná data fungovat nejlépe → potřebné vyzkoušet více klasifikačních metod a zvolit nejvhodnější pro daná data
- u velkých datových souborů je obtížné dopředu určit, zda je možné data oddělit lineárně nebo ne → potřebné vyzkoušet lineární i nelineární klasifikační metody

Příprava nových učebních materiálů
pro obor Matematická biologie

je podporována projektem OPVK

č. CZ.1.07/2.2.00/28.0043

„Interdisciplinární rozvoj studijního
oboru Matematická biologie“

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ