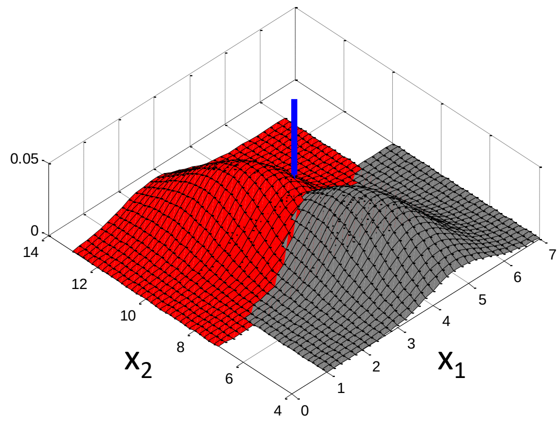
Analýza a klasifikace dat – přednáška 4

RNDr. Eva Koriťáková, Ph.D.

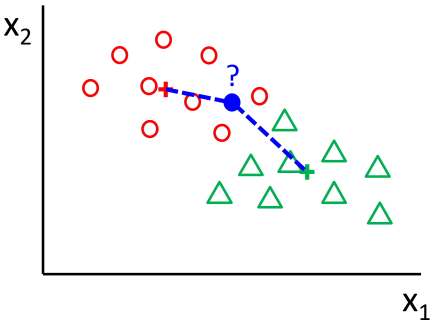
Podzim 2018

Typy klasifikátorů – podle principu klasifikace

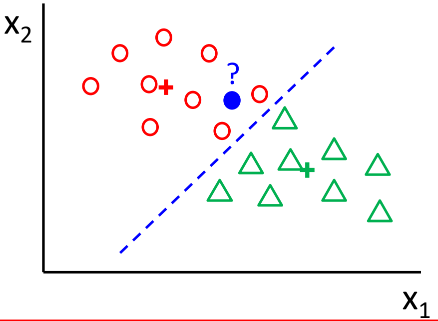
- **klasifikace pomocí diskriminačních funkcí:**
  - diskriminační funkce určují míru příslušnosti k dané klasifikační třídě
  - pro danou třídu má daná diskriminační funkce nejvyšší hodnotu



- **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)

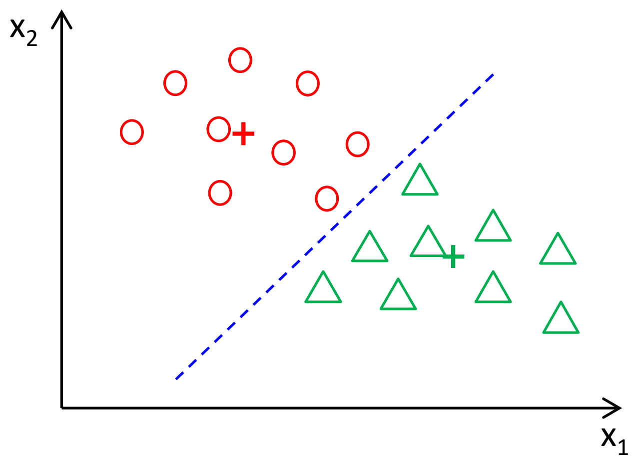


- **klasifikace pomocí hranic v obrazovém prostoru:**
  - stanovení hranic (hraničních ploch) oddělujících klasifikační třídy

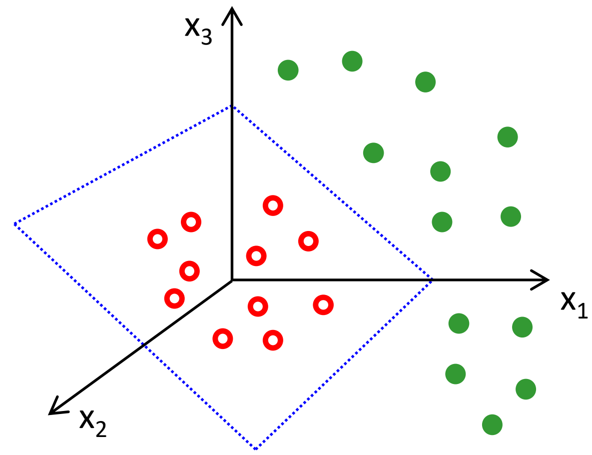


Motivace

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)

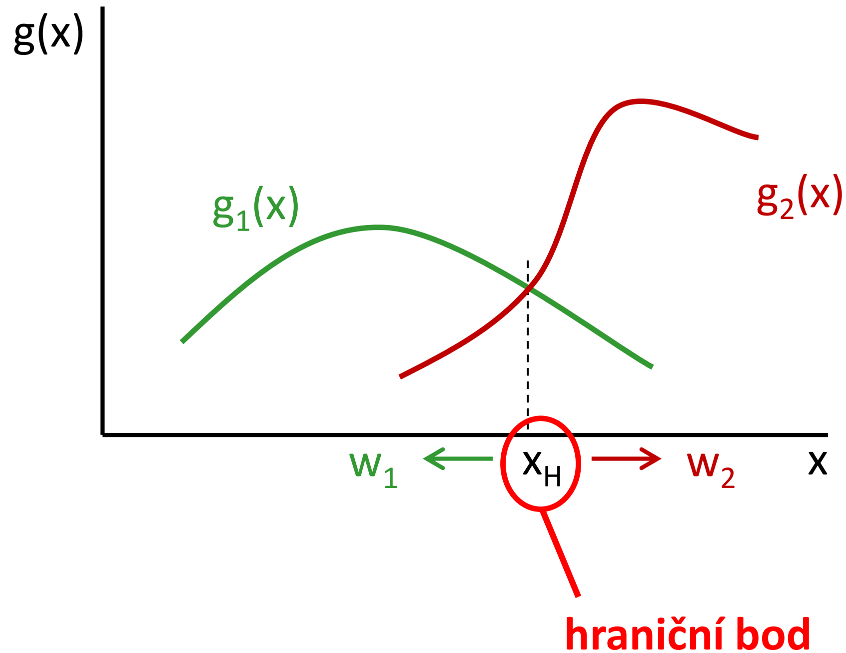
Hranice je tedy dána rovnicí: $\mathrm{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + \mathrm{w}_0 = 0$

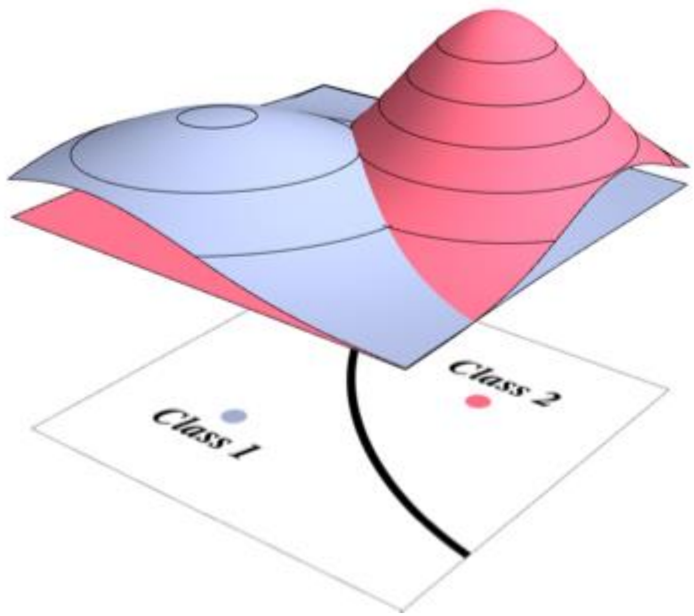
Výpočet hranice různými metodami (např. Fisherova LDA, SVM apod. – viz dále)

Souvislost klasifikace pomocí diskriminačních funkcí s klasifikací pomocí hranic

Hranice mezi dvěma sousedními třídami ω_1 a ω_2 je určena průmětem průsečíku funkcí $g_r(\mathbf{x})$ a $g_s(\mathbf{x})$, definovaného rovnicí $g_r(\mathbf{x}) = g_s(\mathbf{x})$, do obrazového prostoru, tzn.: $\mathrm{h}(\mathbf{x}) = g_1(\mathbf{x}) - g_2(\mathbf{x}) = 0$

např. u Bayesova klasifikátoru: $\mathrm{h}(\mathbf{x}) = P(\omega_D|\mathbf{x}) - P(\omega_H|\mathbf{x}) = 0$





Souvislost klasifikace podle minimální vzdálenosti s klasifikací pomocí hranic

- zařazení objektu **x** do té třídy, jejíž etalon má od bodu **x** minimální vzdálenost – tzn. $d(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}_{rE} - \mathbf{x}\| = \min_{\forall s}\|\mathbf{x}_{sE} - \mathbf{x}\|$

- v případě dvou tříd reprezentovaných etalony $\mathbf{x}_{1E} = (x_{11E}, x_{12E})$ a $\mathbf{x}_{2E} = (x_{21E}, x_{22E})$ ve dvoupříznakovém euklidovském prostoru je vzdálenost mezi obrazem $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ a libovolným z obou etalonů definována:

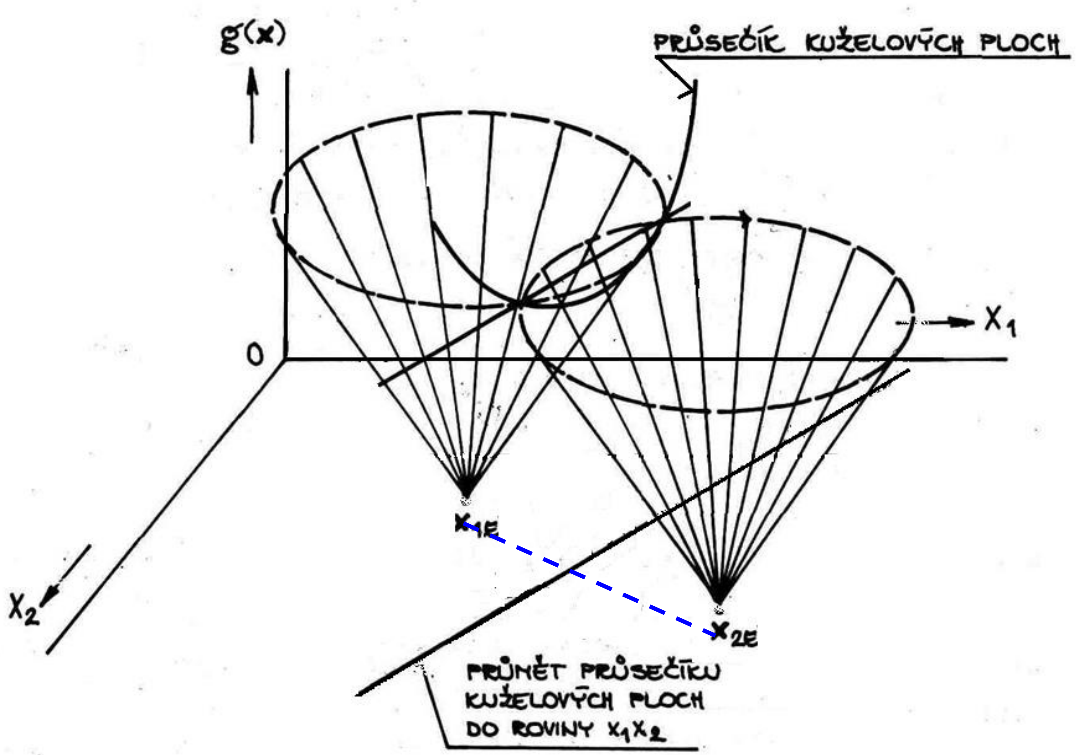
$$v(\mathbf{x}_{sE}, \mathbf{x}) = \|\mathbf{x}_{sE} - \mathbf{x}\| = \sqrt{(x_{s1E} - x_1)^2 + (x_{s2E} - x_2)^2}$$

- hledáme menší z obou vzdáleností, tj. $\min_{s=1,2} v(\mathbf{x}_{sE}, \mathbf{x})$, tzn. $\min_{s=1,2} v^2(\mathbf{x}_{sE}, \mathbf{x})$:

$$\min_{\forall s} v(\mathbf{x}_{sE}, \mathbf{x}) \approx \min_{\forall s} v^2(\mathbf{x}_{sE}, \mathbf{x}) = \min_{\forall s}\left((x_{s1E} - x_1)^2 + (x_{s2E} - x_2)^2\right) =$$

$$\min_{\forall s}\left(x_1^2 + x_2^2 - 2[x_{s1E}x_1 + x_{s2E}x_2 - (x_{s1E}^2 + x_{s2E}^2)/2]\right)$$

Souvislost klasifikace podle minimální vzdálenosti s klasifikací pomocí hranic



- diskriminační kuželové plochy se protínají v parabole a její průmět do obrazové roviny je přímka definovaná vztahem

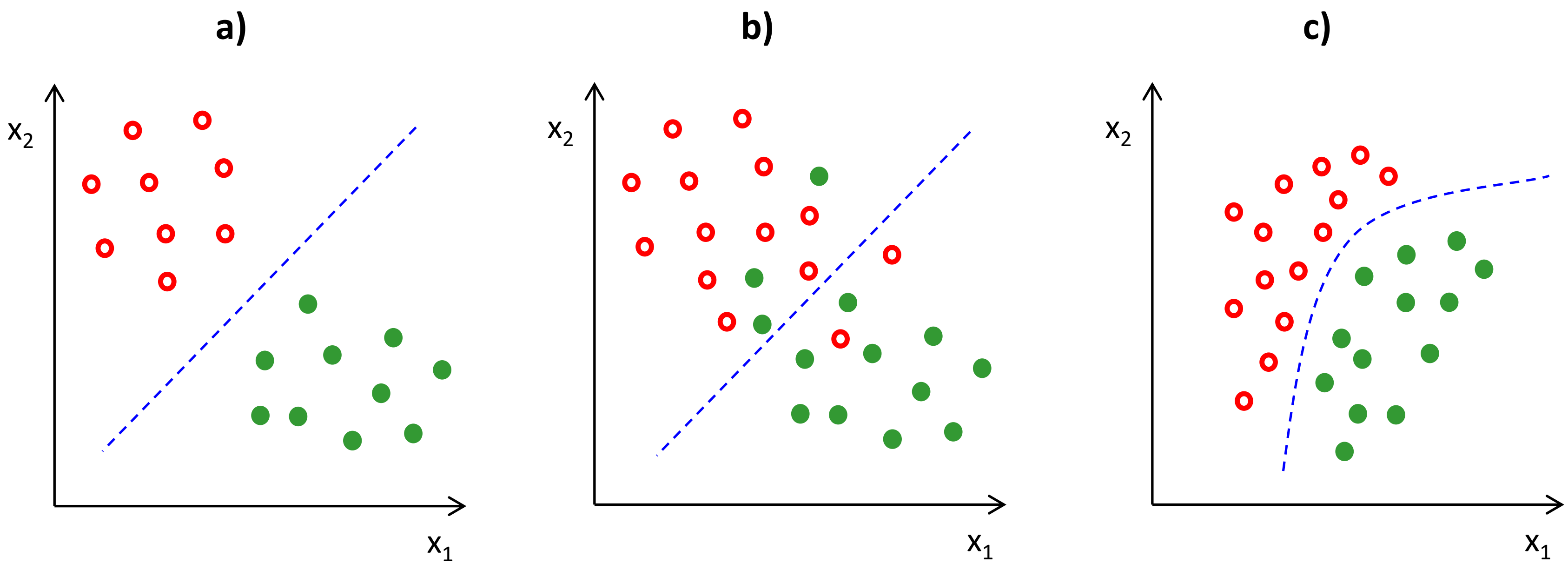
$$x_1(x_{11E} - x_{21E}) + x_2(x_{12E} - x_{22E}) - (x^2_{12E} + x^2_{11E} - x^2_{21E} - x^2_{22E})/2 = 0$$

- tato hraniční přímka mezi klasifikačními třídami je vždy kolmá na spojnici obou etalonů a tuto spojnici půlí
- souvislost s klasifikací podle diskriminačních funkcí

Souvislost jednotlivých principů klasifikace - shrnutí

- Hranice mezi klasifikačními třídami jsou dány průmětem diskriminačních funkcí do obrazového prostoru.
- Klasifikace podle minimální vzdálenosti definuje hranici, která je kolmá na spojnici etalonů klasifikačních tříd a půlí ji.
- Princip klasifikace dle minimální vzdálenosti vede buď přímo, nebo prostřednictvím využití metrik podobnosti k definici diskriminačních funkcí a ty dle prvního ze zde uvedených pravidel k určení hranic mezi klasifikačními třídami.

Lineární separabilita



lineárně separabilní úloha

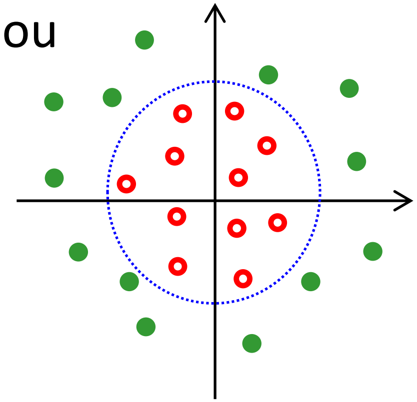
lineárně neseparabilní úloha
lineárně separované klasifikační třídy

nelineárně separabilní úloha

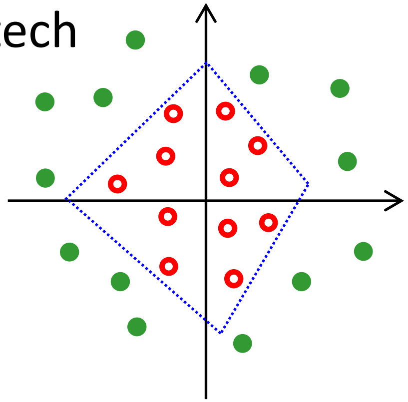
Lineárně neseparabilní třídy – způsoby řešení

1. zachováme původní obrazový prostor a zvolíme nelineární hranici:

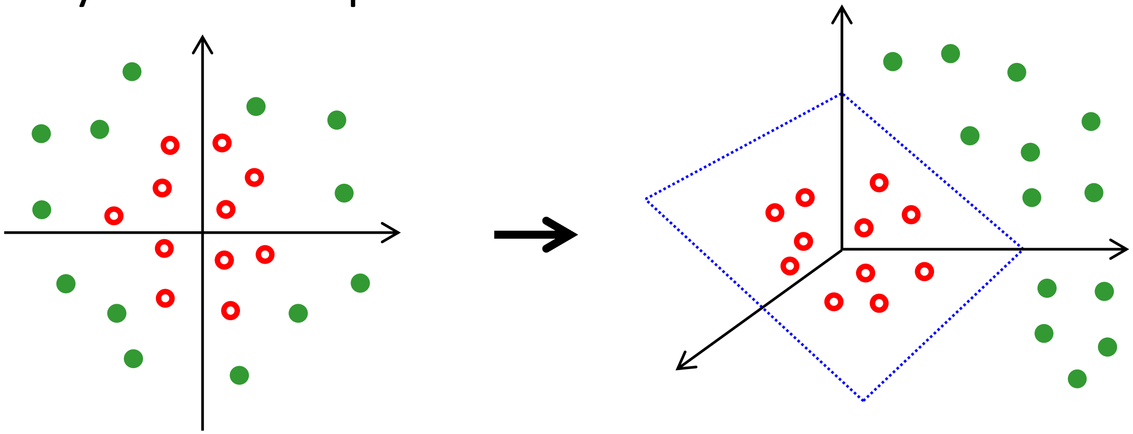
a) definovanou obecně



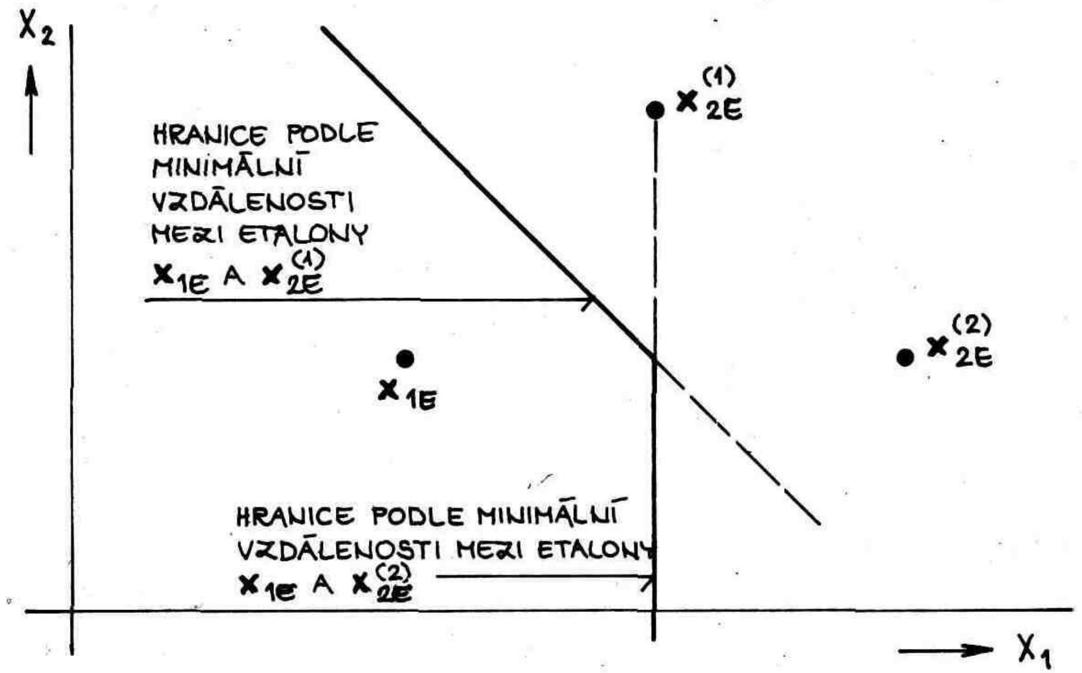
b) složenou po částech z lineárních úseků



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



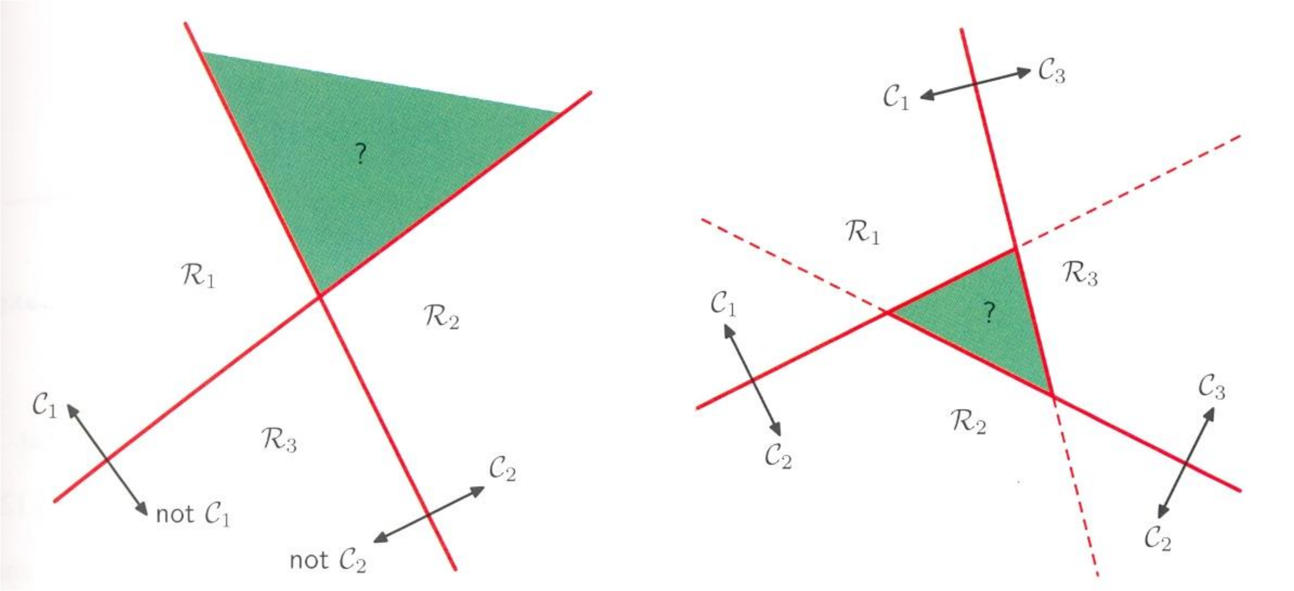
Lineárně neseparabilní třídy – souvislost klasifikace dle minimální vzdálenosti s klasifikací pomocí hranic



Klasifikace podle minimální vzdálenosti s třídami reprezentovanými více etalony je „ekvivalentní“ klasifikaci s po částech lineární hraniční plochou

Klasifikace s více třídami

1. klasifikace „jedna versus zbytek“
   R-1 hranice oddělí jednu klasifikační třídu od všech dalších
2. klasifikace „jedna versus jedna“
   R(R-1)/2 binárních hranic mezi každými dvěma třídami



- problematickým úsekům se můžeme vyhnout použitím diskriminačních funkcí (do r-té třídy ωr zařadíme obraz x za předpokladu, že $g_r(\mathbf{x}) > g_s(\mathbf{x})$ pro $\forall\ r \neq s$)
  → klasifikační hranice je průmět průsečíku $g_r(\mathbf{x}) = g_s(\mathbf{x})$ do obrazového prostoru – takto definovaný klasifikační prostor je vždy spojitý a konvexní

Metody stanovení klasifikačních hranic

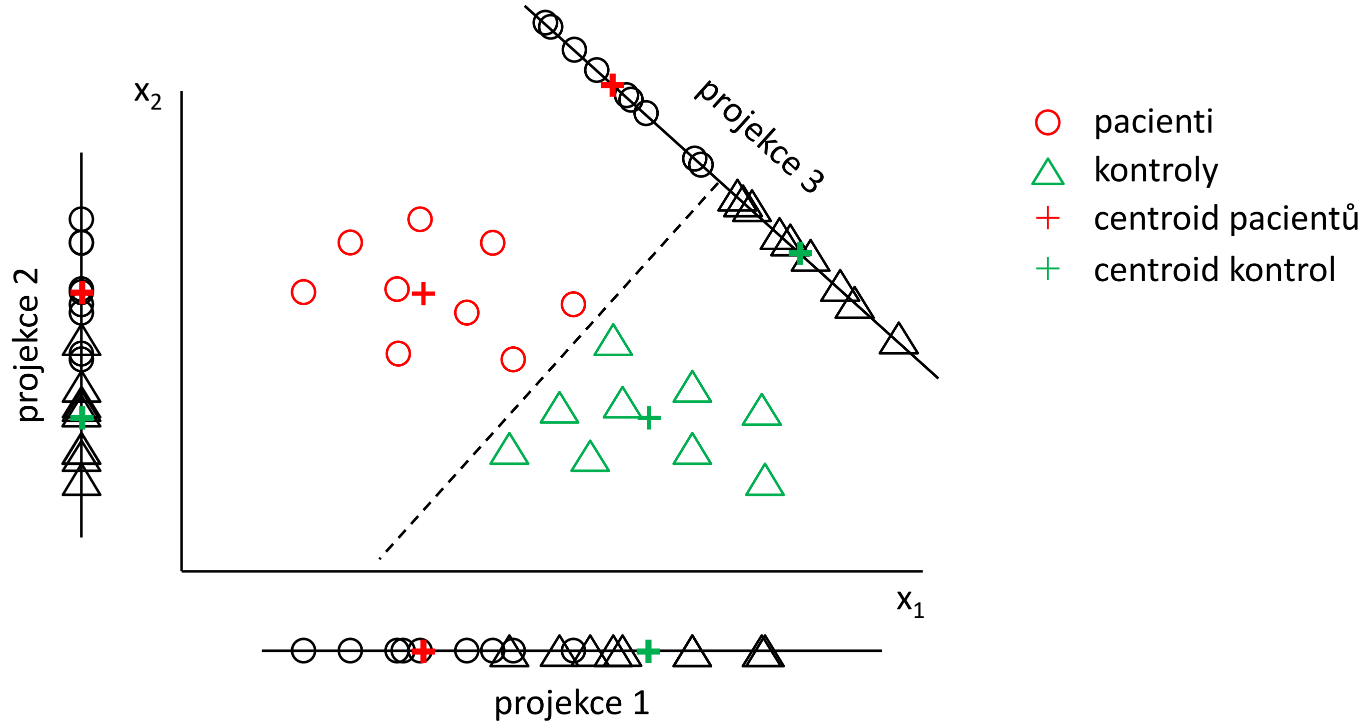
- Fisherova lineární diskriminace (FLDA)
- Algoritmus podpůrných vektorů
- Metoda nejmenších čtverců
- Perceptron

Metody stanovení klasifikačních hranic

- Fisherova lineární diskriminace (FLDA)
- Algoritmus podpůrných vektorů
- Metoda nejmenších čtverců
- Perceptron

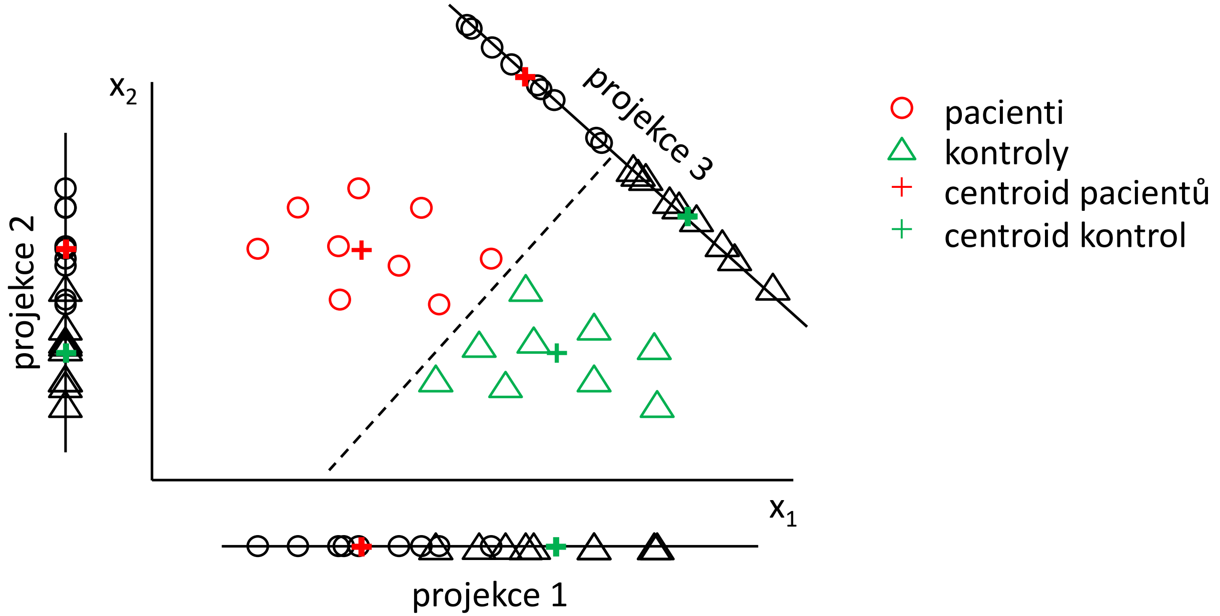
Fisherova lineární diskriminace

- jiný název: Fisherova lineární diskriminační analýza (FLDA)
- použití pro lineární klasifikaci
- princip: transformace do jednorozměrného prostoru tak, aby se třídy od sebe maximálně oddělily



- předpoklad: vícerozměrné normální rozdělení u jednotlivých skupin

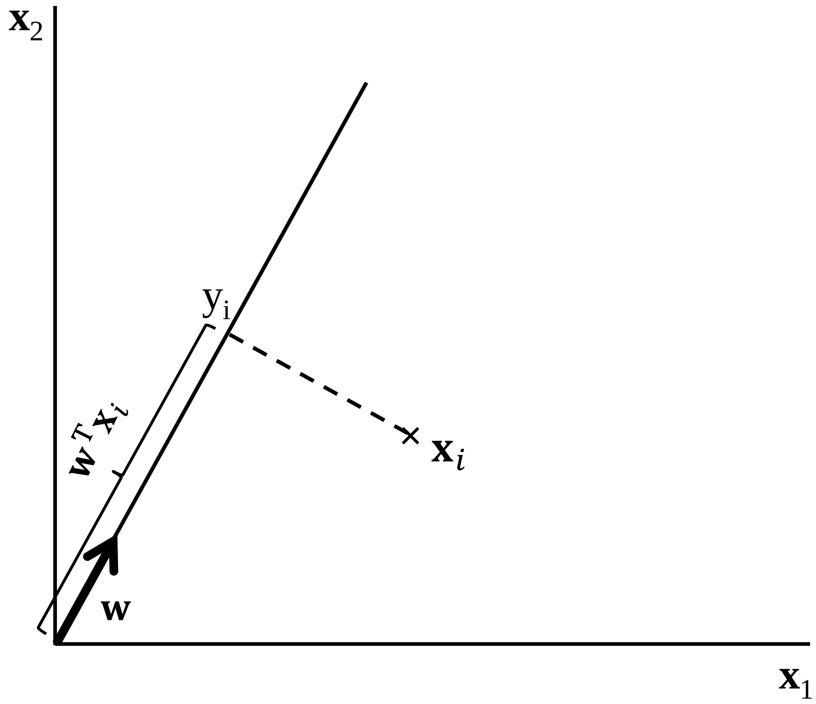
Fisherova lineární diskriminace – princip



- podstatou FLDA tedy projekce do 1-D prostoru tak, že chceme:
  - maximalizovat vzdálenost skupin
  - minimalizovat variabilitu uvnitř skupin
- Fisherovo diskriminační kritérium je tedy ve tvaru: $J(\mathbf{w}) = \frac{\boxed{(\bar{y}_D - \bar{y}_H)^2}}{\boxed{s_D^2 + s_H^2}}$

kde s_D^2 a s_H^2 jsou rozptyly uvnitř třídy pacientů resp. kontrol po projekci do 1-D prostoru a $\bar{y}_D$ a $\bar{y}_H$ jsou projekce centroidu třídy pacientů resp. kontrol

Projekce do 1-D prostoru



$$y_i = \mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{x}_i$$

- bod $\mathbf{x}_i$ reprezentuje i-tý subjekt
- y_i je projekce bodu $\mathbf{x}_i$
- $\mathbf{w}$ je váhový vektor udávající směr 1-D prostoru

Projekce do 1-D prostoru

- projekce centroidů skupiny pacientů a kontrolních subjektů:

$$\bar{\mathbf{x}}_D = \left[\frac{1}{n_D}\sum_{i=1}^{n_D} \mathrm{x}_{i1} \quad \frac{1}{n_D}\sum_{i=1}^{n_D} \mathrm{x}_{i2} \quad \cdots \quad \frac{1}{n_D}\sum_{i=1}^{n_D} \mathrm{x}_{ip}\right] \rightarrow \bar{\mathrm{y}}_D = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\bar{\mathbf{x}}_D$$

$$\bar{\mathbf{x}}_H = \left[\frac{1}{n_H}\sum_{i=1}^{n_H} \mathrm{x}_{i1} \quad \frac{1}{n_H}\sum_{i=1}^{n_H} \mathrm{x}_{i2} \quad \cdots \quad \frac{1}{n_H}\sum_{i=1}^{n_H} \mathrm{x}_{ip}\right] \rightarrow \bar{\mathrm{y}}_H = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\bar{\mathbf{x}}_H$$

- výpočet rozptylu uvnitř třídy pacientů po projekci do 1-D prostoru:

$$\mathrm{s}_D^2 = \frac{1}{n_D-1}\sum_{i=1}^{n_D}(\mathrm{y}_i - \bar{\mathrm{y}}_D)^2 = \frac{1}{n_D-1}\sum_{i=1}^{n_D}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_i - \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\bar{\mathbf{x}}_D\right)^2 = \frac{1}{n_D-1}\sum_{i=1}^{n_D}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}_D)\right)^2$$

$$= \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\left(\frac{1}{n_D-1}\sum_{i=1}^{n_D}(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}_D)(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}_D)^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{w} = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{S}_D\mathbf{w}$$

- analogicky výpočet rozptylu uvnitř třídy kontrol po projekci do 1-D prostoru:
  $\mathrm{s}_H^2 = \cdots = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_H\mathbf{w}$

Fisherovo diskriminační kritérium – rozepsání

- Fisherovo diskriminační kritérium: $\mathrm{J}(\mathbf{w}) = \frac{(\bar{y}_D - \bar{y}_H)^2}{s_D^2 + s_H^2}$

- rozepsání součtu rozptylů uvnitř jednotlivých tříd po transformaci do 1-D prostoru (tzn. rozepsání jmenovatele Fisherova diskr. kritéria):

  $$s_D^2 + s_H^2 = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_D\mathbf{w} + \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_H\mathbf{w} = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}(\mathbf{S}_D + \mathbf{S}_H)\mathbf{w} = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_W\mathbf{w},$$

  kde $\mathbf{S}_W$ je suma čtverců variability uvnitř skupin a lze ji vypočítat jako: $\mathbf{S}_W = \mathbf{S}_D + \mathbf{S}_H$

  v obecném případě (při nevyvážených počtech subjektů ve skupinách) – vážená suma čtverců variability uvnitř skupin: $\mathbf{S}_W = \frac{(n_D - 1)\mathbf{S}_D + (n_H - 1)\mathbf{S}_H}{(n_D + n_H - 2)}$

- rozepsání rozdílu centroidů promítnutých do 1-D prostoru (tzn. rozepsání čitatele Fisherova diskr. kritéria):

  $$(\bar{y}_D - \bar{y}_H)^2 = \left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\bar{\mathbf{x}}_D - \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\bar{\mathbf{x}}_H\right)^2 = \left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}(\bar{\mathbf{x}}_D - \bar{\mathbf{x}}_H)\right)^2 = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}(\bar{\mathbf{x}}_D - \bar{\mathbf{x}}_H)(\bar{\mathbf{x}}_D - \bar{\mathbf{x}}_H)^{\mathrm{T}}\mathbf{w} = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_B\mathbf{w},$$

  kde $\mathbf{S}_B$ je suma čtverců variability mezi skupinami

- Fisherovo diskr. kritérium lze tedy vyjádřit jako: $\mathrm{J}(\mathbf{w}) = \frac{(\bar{y}_D - \bar{y}_H)^2}{s_D^2 + s_H^2} = \frac{\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_B\mathbf{w}}{\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_W\mathbf{w}}$

Fisherovo diskriminační kritérium – maximalizace

- Fisherovo diskriminační kritérium: $\mathrm{J}(\mathbf{w}) = \frac{(\bar{y}_D - \bar{y}_H)^2}{s_D^2 + s_H^2} = \frac{\mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{S}_B\mathbf{w}}{\mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{S}_W\mathbf{w}}$
- Chceme maximalizovat $\mathrm{J}(\mathbf{w})$, proto $\mathrm{J}(\mathbf{w})$ zderivujeme a položíme výraz roven 0:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}}\mathrm{J}(\mathbf{w}) = 0$$

$$\frac{\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}}\mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{S}_B\mathbf{w}\right)\mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{S}_W\mathbf{w} - \mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{S}_B\mathbf{w}\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}}\mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{S}_W\mathbf{w}\right)}{(\mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{S}_W\mathbf{w})^2} = 0$$

$$\frac{(2\mathbf{S}_B\mathbf{w})\mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{S}_W\mathbf{w} - \mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{S}_B\mathbf{w}(2\mathbf{S}_W\mathbf{w})}{(\mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{S}_W\mathbf{w})^2} = 0$$

$$(\mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{S}_B\mathbf{w})\mathbf{S}_W\mathbf{w} = (\mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{S}_W\mathbf{w})\mathbf{S}_B\mathbf{w}$$

- u vektoru $\mathbf{w}$ nás nezajímá jeho modul (tzn. velikost), jen jeho směr, proto můžeme pominout skalární členy $\mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{S}_B\mathbf{w}$ a $\mathbf{w}^\mathrm{T}\mathbf{S}_W\mathbf{w}$, čímž dostáváme:

$$\mathbf{S}_W\mathbf{w} \sim \mathbf{S}_B\mathbf{w}$$

Fisherovo diskriminační kritérium – maximalizace

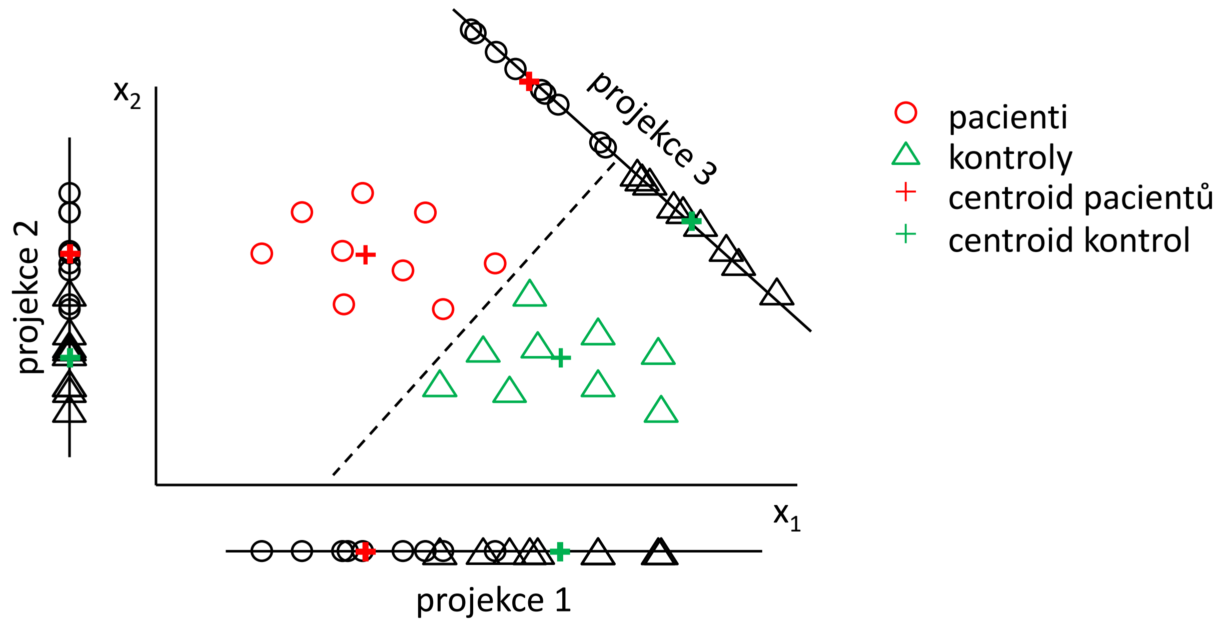
$$\mathbf{S}_W\mathbf{w} \sim \mathbf{S}_B\mathbf{w}$$

- protože $\mathbf{S}_B\mathbf{w} = (\bar{\mathbf{x}}_D - \bar{\mathbf{x}}_H)(\bar{\mathbf{x}}_D - \bar{\mathbf{x}}_H)^{\mathrm{T}}\mathbf{w} = (\bar{\mathbf{x}}_D - \bar{\mathbf{x}}_H) \cdot \alpha$, kde α je nějaký skalár → $\mathbf{S}_B\mathbf{w}$ má tedy směr $(\bar{\mathbf{x}}_D - \bar{\mathbf{x}}_H)$ a jeho modul α nás nezajímá, proto:

$$\mathbf{S}_W\mathbf{w} \sim (\bar{\mathbf{x}}_D - \bar{\mathbf{x}}_H)$$

- z čehož vypočteme váhový vektor $\mathbf{w}$ jako: $\boxed{\mathbf{w} \sim \mathbf{S}_W^{-1}(\bar{\mathbf{x}}_D - \bar{\mathbf{x}}_H)}$

Fisherova LDA – výpočet hranice

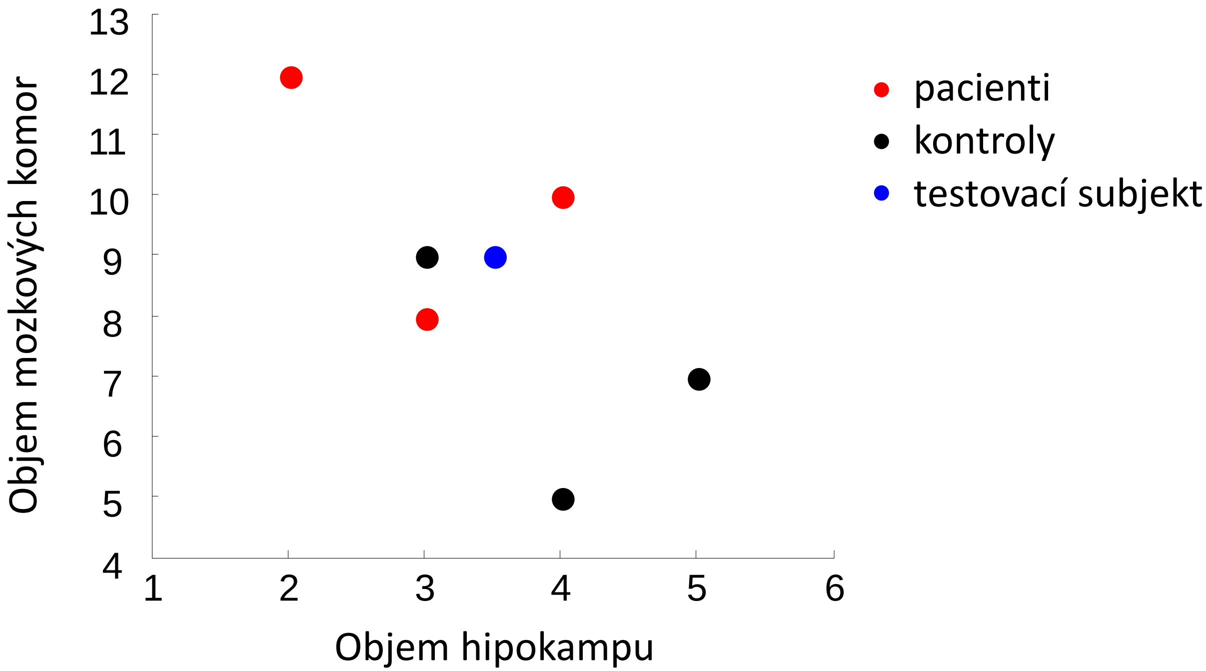


- hranice je dána: $\mathbf{w}^{T}\mathbf{x} - \tilde{y} = 0$, kde $\tilde{y}$ je průmět hraničního bodu v 1-D prostoru a lze ho vypočítat jako: $\tilde{y} = \frac{\bar{y}_D + \bar{y}_H}{2}$
- pokud chceme zařadit nový subjekt $\mathbf{x}_0$ do jedné z daných tříd, jeho průmět do 1-D prostoru ($y_0 = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_0$) srovnáme s průmětem hraničního bodu $\tilde{y}$:
  - Pokud $y_0 < \tilde{y}$ (přičemž $\bar{y}_H < \tilde{y}$), subjekt zařadíme do skupiny kontrolních subjektů
  - Pokud $y_0 > \tilde{y}$ (přičemž $\bar{y}_H < \tilde{y}$), subjekt zařadíme do skupiny pacientů

Příklad

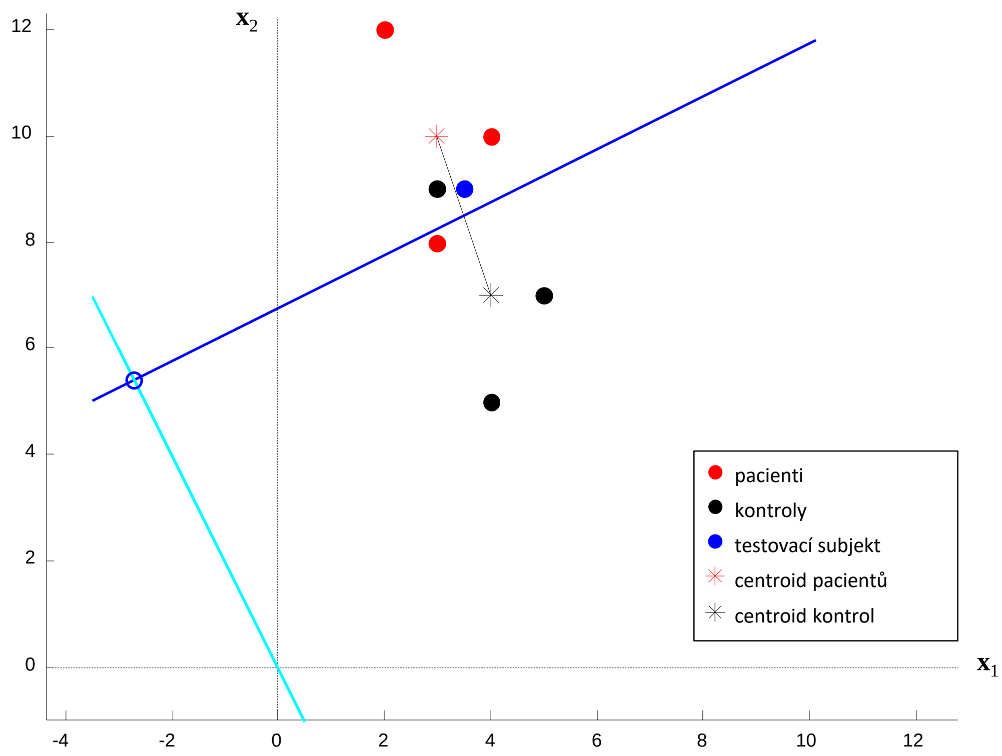
Příklad: Bylo provedeno měření objemu hipokampu a mozkových komor (v cm^3) u 3 pacientů se schizofrenií a 3 kontrol: $\mathbf{X}_D = \begin{bmatrix} 2 & 12 \\ 4 & 10 \\ 3 & 8 \end{bmatrix}$, $\mathbf{X}_H = \begin{bmatrix} 5 & 7 \\ 3 & 9 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$.

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



Příklad – řešení

$$\mathbf{X}_D = \begin{bmatrix} 2 & 12 \\ 4 & 10 \\ 3 & 8 \end{bmatrix}, \mathbf{X}_H = \begin{bmatrix} 5 & 7 \\ 3 & 9 \\ 4 & 5 \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} \bar{\mathbf{x}}_D = [3 \quad 10] \\ \bar{\mathbf{x}}_H = [4 \quad 7] \end{matrix} \quad \mathbf{S}_D = \mathbf{S}_H = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 4 \end{bmatrix} \quad \mathbf{x}_0 = [3{,}5 \quad 9]$$



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