Lineární klasifikátory a kernel funkce

Nature Inspired
Technologies Group

Geometrické modely

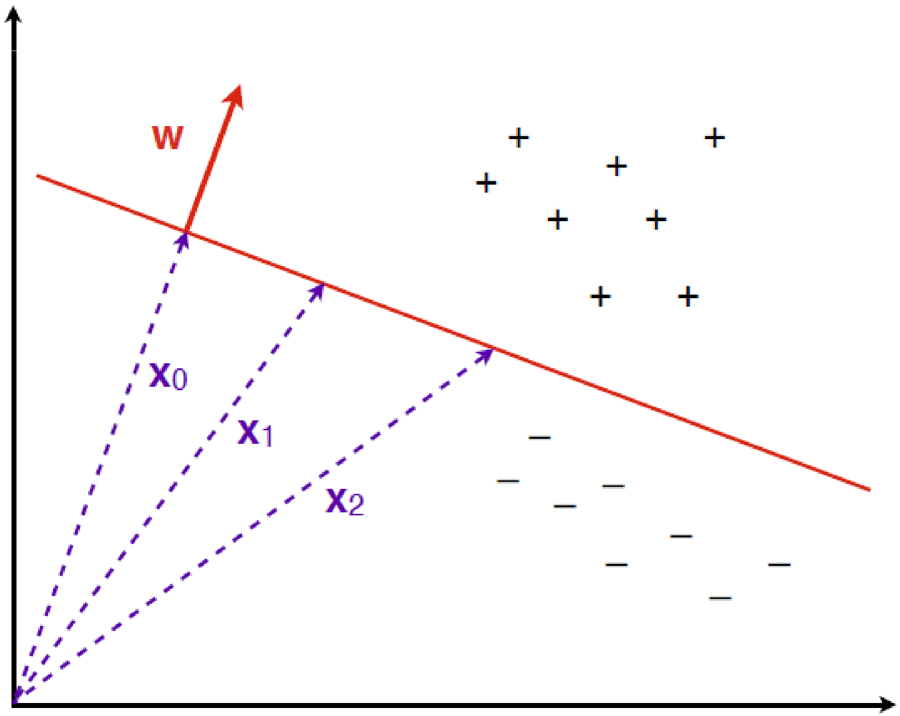
- Geometrický model hledá hranici mezi pozitivními a negativními příklady ve tvaru geometrického útvaru (přímka, rovina, koule, ..)

- Lineární model má obecně tvar $\boldsymbol{w} . \boldsymbol{x} = t$, kde $\boldsymbol{x}$ je bod na hranici a $\boldsymbol{w}$ vektor směřující kolmo na tuto hranici a operace „ . “ reprezentuje **skalární součin**

Poznámka. Není-li řečeno jinak, je (x,y) chápáno ve dvou významech. Může jít o

- **bod** se příslušnými souřadnicemi
- **vektor** mezi body (0,0) a (x,y).

Proto se v dalším někdy oba pojmy používají jako synonyma.

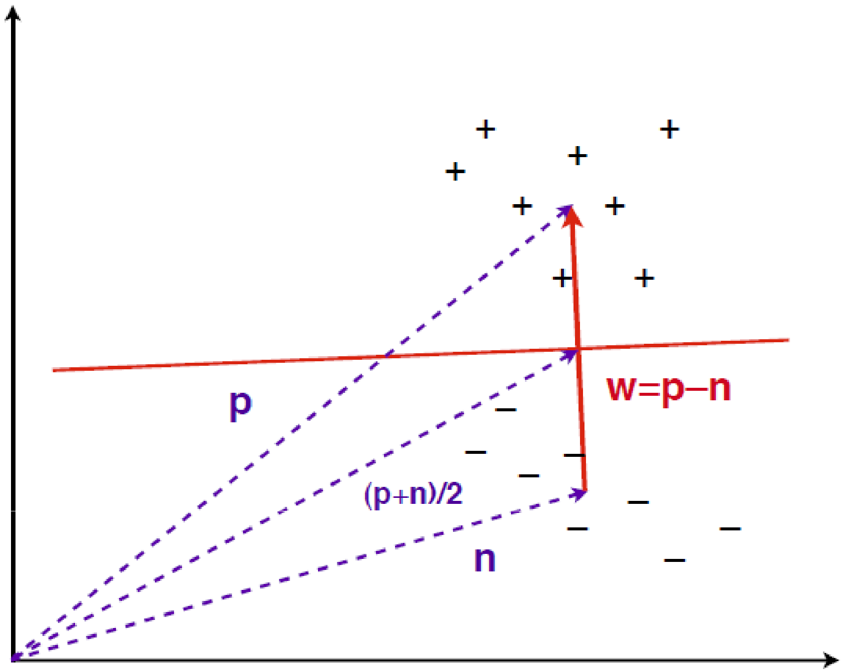


Hledáme **w** a t tak, aby hranici tvořily body **x** splňující rovnici

w . **x** = t (1)

Jednoduchý postup, jak najít vhodnou hranici, je vyjít z **p** a **n**, která označují „těžiště" pro množinu pozitivních a pro množinu negativních příkladů.

V takovém případě musí být bod (**p+n**)/2 na příslušné hranici, a tedy pro něj platí rovnice (1) .



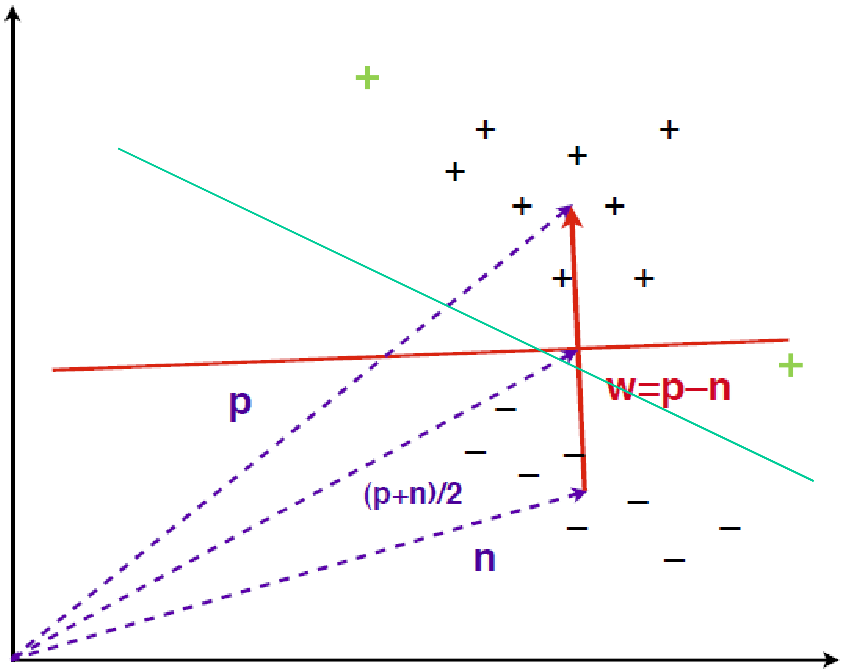
Označme $||\mathbf{x}||$ délku vektoru **x**

$$t = (\mathbf{p} - \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{p} + \mathbf{n}) / 2 = (||\mathbf{p}||^2 - ||\mathbf{n}||^2) / 2$$

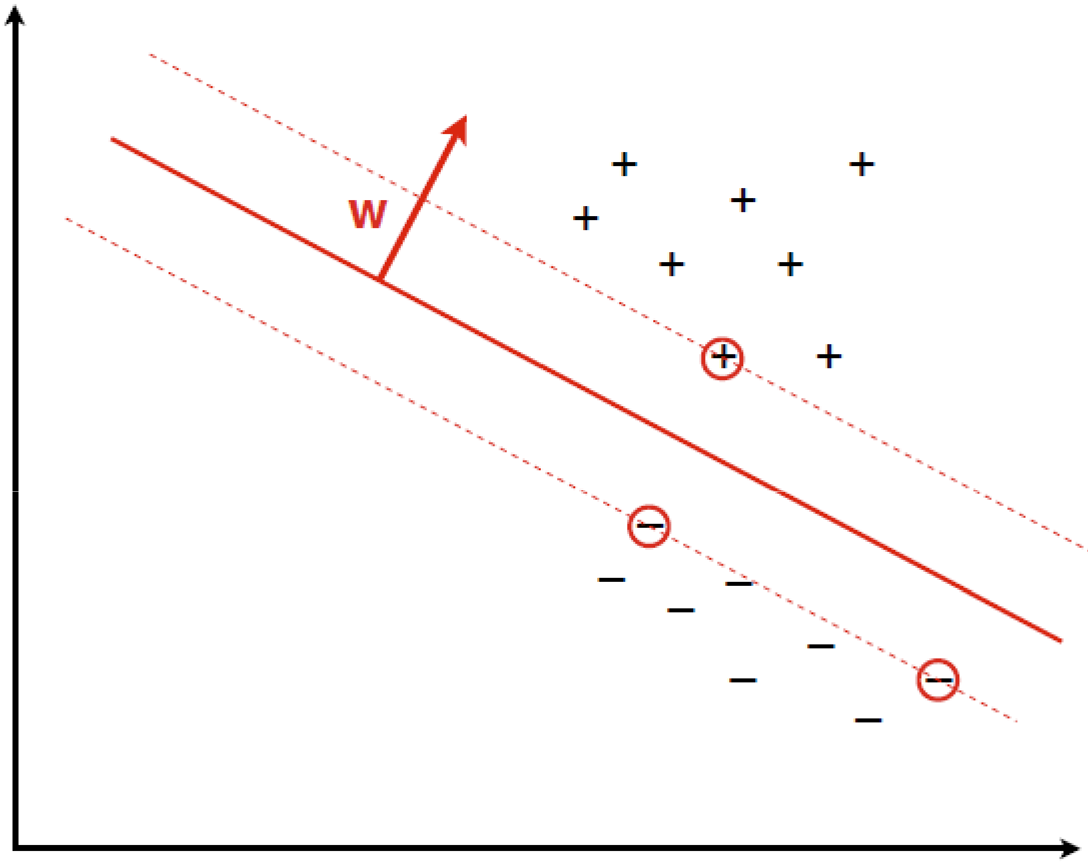
Pozor!

Doplněním dalších dvou nových bodů mezi pozitivní příklady se nezmění těžiště ani nalezená hranice. Nový příklad však už původní hranicí není správně klasifikován!

Nebylo by bývala lepší jiná hranice? Je nutné vybírat hranici pečlivě a stanovit pro ni takové kriterium, aby zvyšovalo šanci na to, že hranice bude oddělovat od sebe i nové příklady!



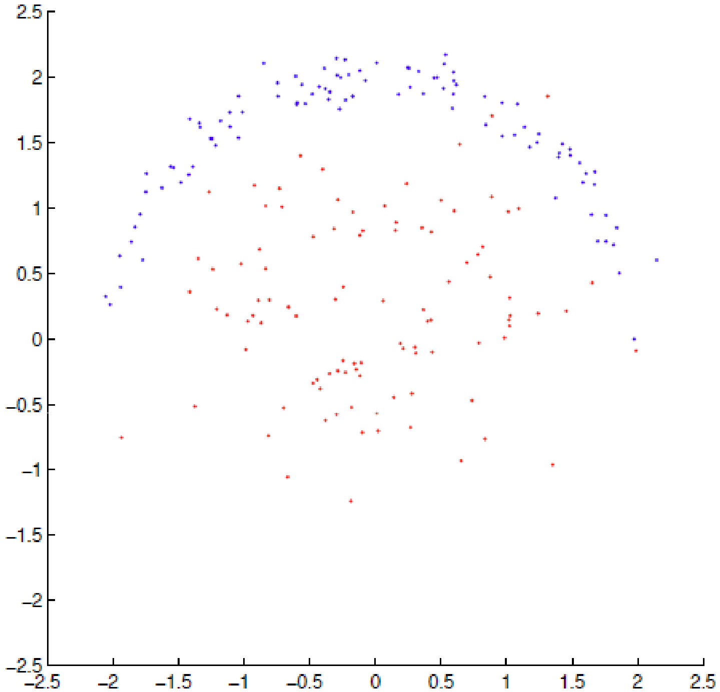
- Vhodných hranic je velmi mnoho : jak vybrat tu správnou?
- Přirozené kriterium volí hranice, v jejichž blízkém okolí nejsou žádné body trénovací množiny (***large margin classifiers*** - LMC).
- Hledání LMC realizuje **support vector machine**



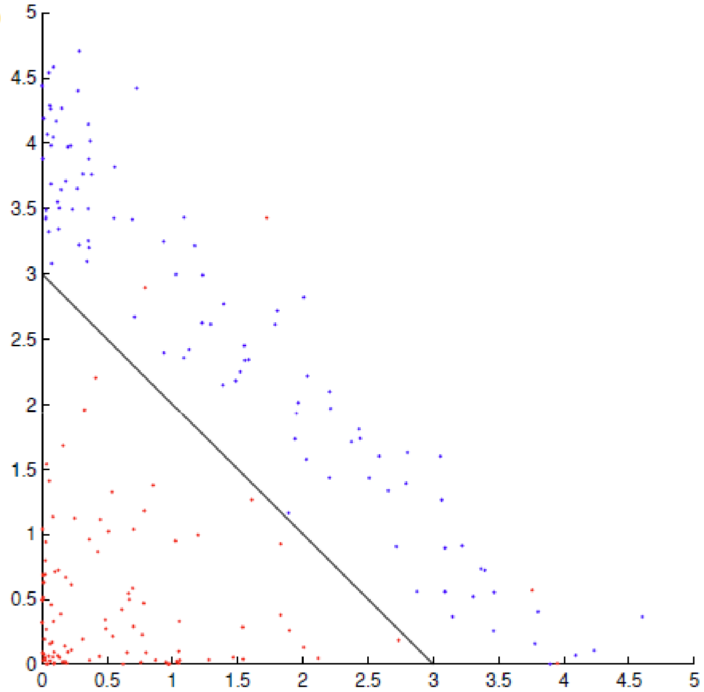
Nature Inspired Technologies Group

Co s daty, která nejsou lineárně separabilní?

a)



b)



Transformace původního bodu (x,y) v obr. a) do jiných souřadnic, a to na bod $(x',y') = (x^2,y^2)$, viz obr. b), situaci zásadně změní:

Body jsou separabilní a vhodná hranice je např. $x'+y' = 3$

Kernel funkce

- Není nutné se omezovat jen na transformace do prostoru stejné dimenze jako byl ten původní. Použijme transformaci

$$(x, y) \mapsto (x^2, y^2, \sqrt{2}xy)$$

- Uvažujme body $\boldsymbol{x}_1 = (x_1, y_1)$ a $\boldsymbol{x}_2 = (x_2, y_2)$ transformované na body $\boldsymbol{x}_1' = (x_1^2, y_1^2, \sqrt{2}x_1y_1)$ a $\boldsymbol{x}_2' = (x_2^2, y_2^2, \sqrt{2}x_2y_2)$. Abychom mohli hledat lineární hranici v novém prostoru. Budeme potřebovat počítat **skalární součin**

$$\mathbf{x}_1' \cdot \mathbf{x}_2' = x_1^2 x_2^2 + y_1^2 y_2^2 + 2x_1 y_1 x_2 y_2 = (x_1 x_2 + y_1 y_2)^2 = (\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2)^2$$

- Funkce, která dokáže vypočítat hodnotu skalárního součinu pro vektory (body) $\boldsymbol{x}_1'$ a $\boldsymbol{x}_2'$ z nového prostoru pouze z původních hodnot $\boldsymbol{x}_1 = (x_1, y_1)$ a $\boldsymbol{x}_2 = (x_2, y_2)$ se nazývá **kernel funkce**. Zde je kernel

$$\mathbf{x}_1' \cdot \mathbf{x}_2' = \kappa(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2)^2$$

Kernel trik: kernel funkce a hledání hranice

- Kernel nám pomůže určit mez v původním prostoru, pokud obrazy **p'** a **n'** původních těžišť **p**=(0,1) a **n**=(0,0) budou těžišti i v novém prostoru. Předpokládejme, že to platí pro malé množiny dat.
- Pro jednoduchost nechť **p** je získáno jako těžiště dvou bodů $\mathbf{p_1}$=(-1,1) a $\mathbf{p_2}$=(1,1)
- Rovnice hranice v novém prostoru je pak (**p'** - **n'**). **x'** = *t*, čili

  $(½(\mathbf{p_1'} + \mathbf{p_2'}) - \mathbf{n'}).\mathbf{x'} = t$ a po úpravě

  $$½\mathbf{p_1'}.\,\mathbf{x'} + ½\mathbf{p_2'}\,.\,\mathbf{x'} - \mathbf{n'}\,.\,\mathbf{x'} = t \qquad \mathbf{(1)}$$

- Pro obraz **x'** bodu **x** = (*x*,*y*), který leží na právě určené lineární hranici, a pro ostatní body v novém prostoru při úpravě **(1)** s výhodou využijeme „kernel trik" pro výpočet skalárního součinu (např. **n'** . **x'** = $(\mathbf{n.x})^2$) :

  $$½(-x + y)^2 + ½(x + y)^2 - (0.\,x + 0.y)^2 = t$$

  čili $x^2 + y^2 = t$, což je rovnice hranice pro původní prostor !

Obecně, „kernelizace" používá pro hledání hranice **celou původní množinu dat** !