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 ***w . x*** = *t* , kde
  - ***x*** je vektor mezi bodem na této hranici a počátkem souřadnic (0,0)
  - ***w*** vektor směřující kolmo na tuto hranici
  - a operace „ **.**“ reprezentuje **skalární součin**

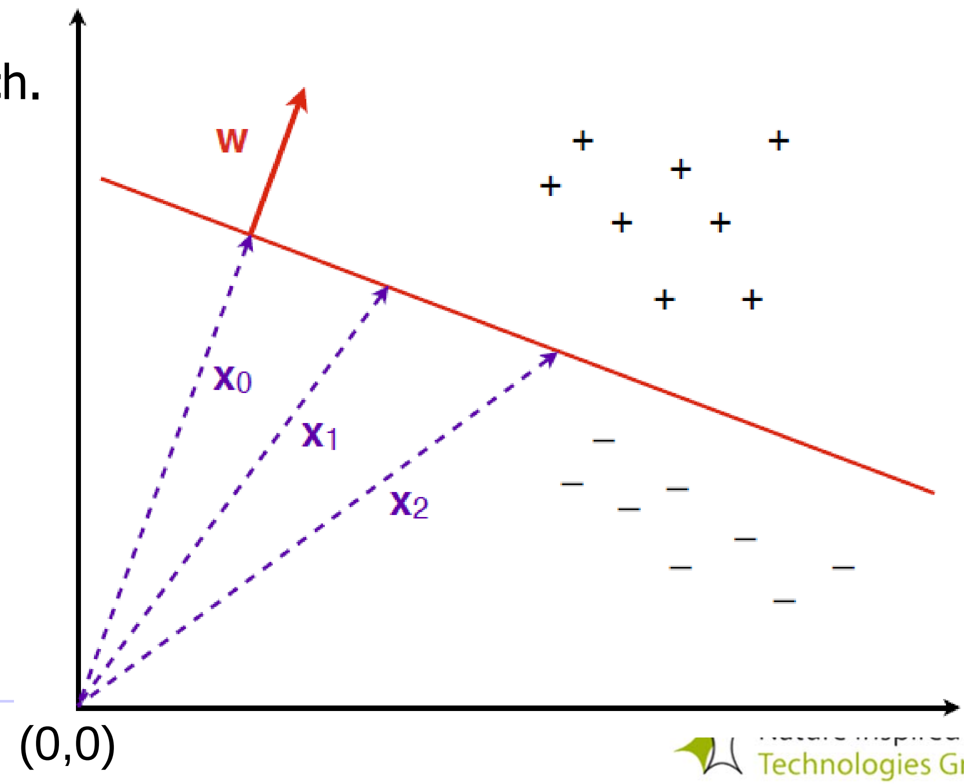
Poznámka. Není-li řečeno jinak, je (x,y) chápáno ve dvou významech. Může jít o

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

Proto se v dalším někdy oba pojmy používají jako synonyma.

Připomenutí: Nechť $\boldsymbol{u} = (u_1,\ u_2)$ a $\boldsymbol{v} = (v_1,\ v_2)$ jsou vektory, pak

$$\boldsymbol{u} \, . \, \boldsymbol{v} = u_1 * v_1 + u_2 * v_2$$

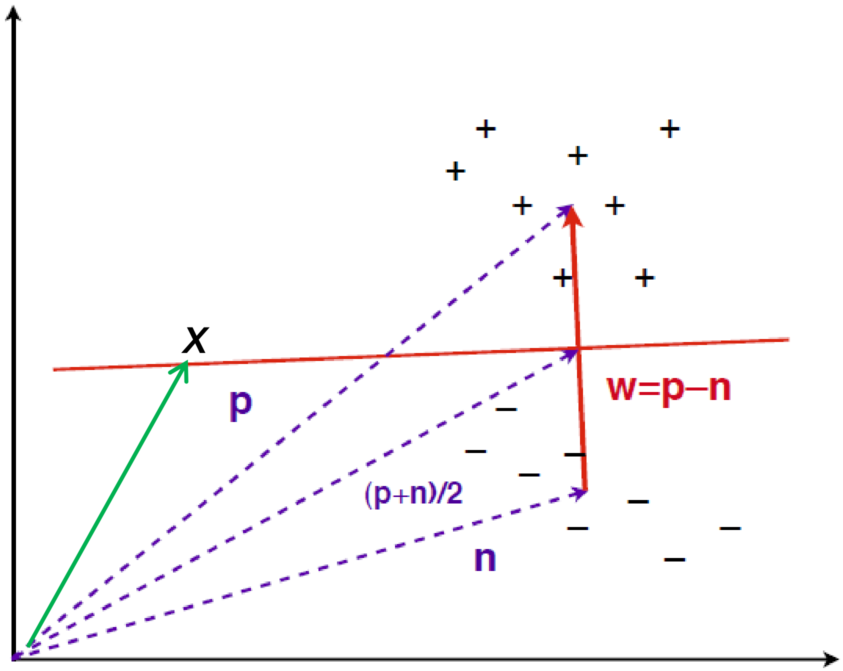


Hledáme **w** a *t* tak, aby hranici tvořily body **x** splňující rovnici

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



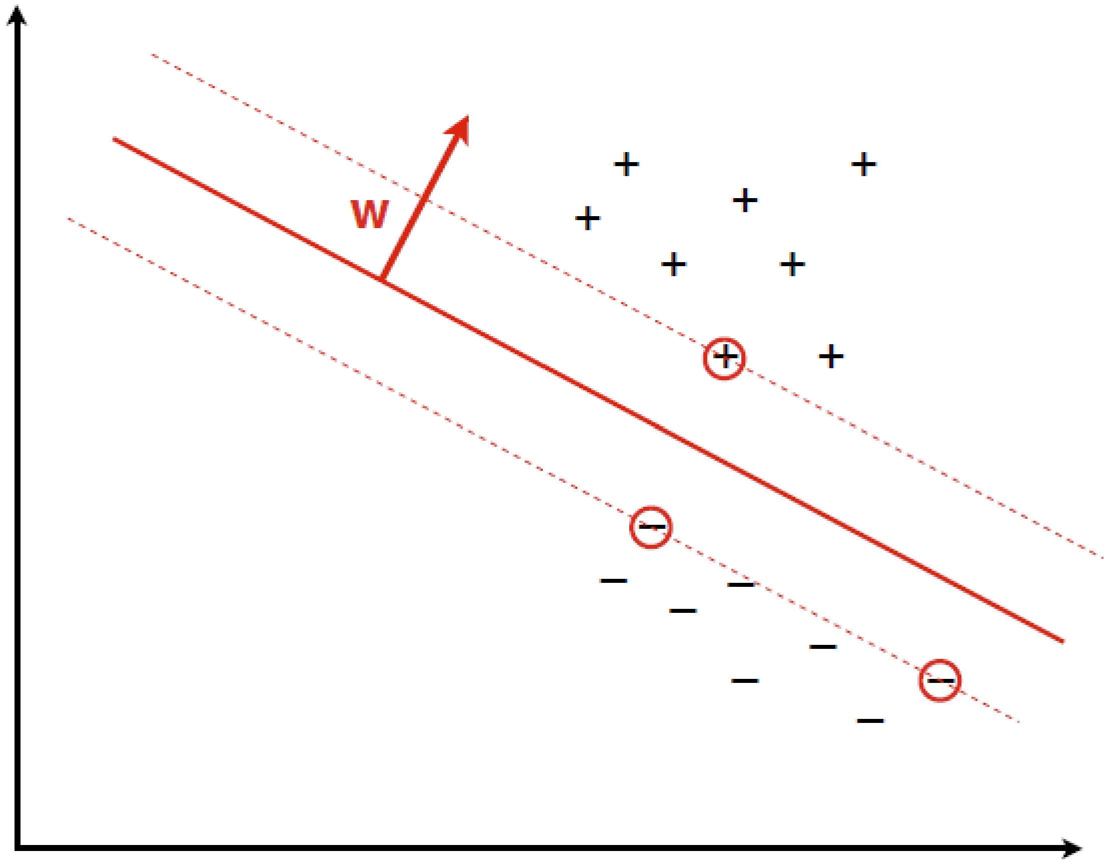
- bod (**p+n**)/2 být na příslušné hranici
- a navíc musí být vektor **x**-(**p+n**)/2 kolmý na **w=p-n.**

To je ekvivalentní podmínce **(p-n)** . (**x**-(**p+n**)/2) = 0 (2)

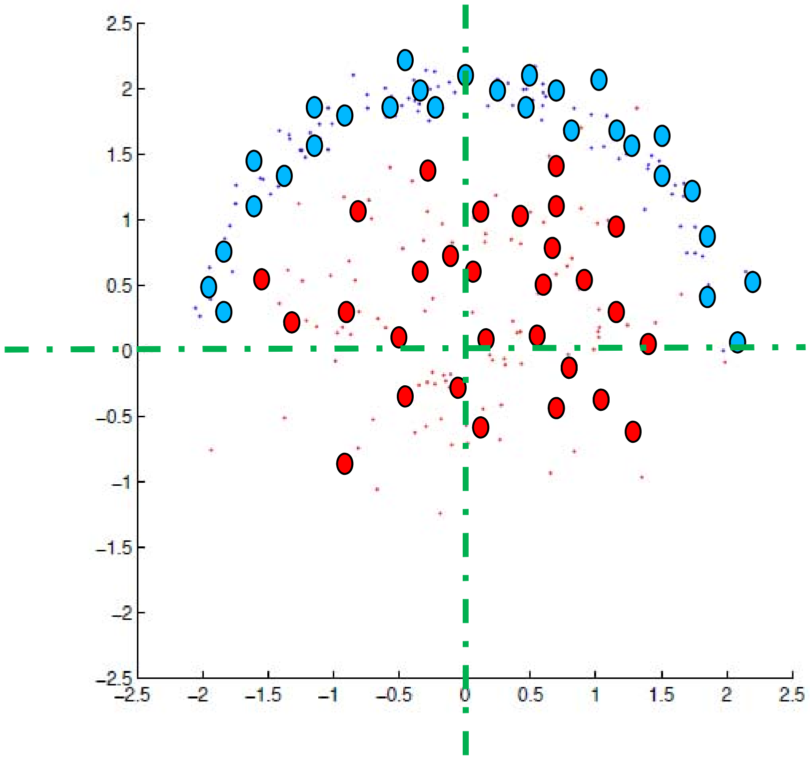
Úpravou rovnice (2) pak dostáváme hodnotu *t* (||**p**|| = $\sqrt{\mathbf{p.p}}$ a odpovídá délce vektoru **p**).

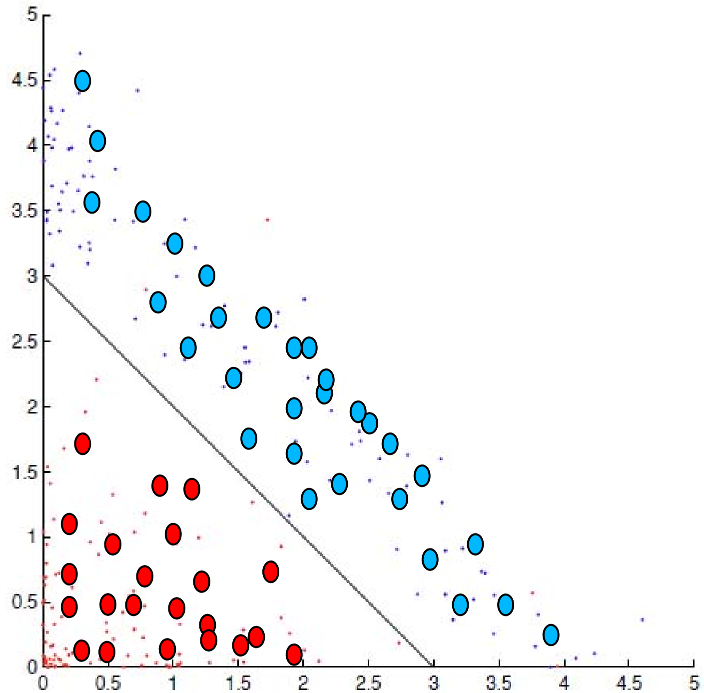
$$t = (\mathbf{p} - \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{p} + \mathbf{n}) / 2 = (||\mathbf{p}||^2 - ||\mathbf{n}||^2) / 2$$

- 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**



Co s daty, která nejsou lineárně separabilní?





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

Body se stanou 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** $\boldsymbol{x}_1{}' \,.\, \boldsymbol{x}_2{}'$:

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

- Funkce, která dokáže vypočítat hodnotu skalárního součinu pro vektory (body) $\boldsymbol{x}_1{}'$ a $\boldsymbol{x}_2{}'$ v novém 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 $\kappa(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2)^2$

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, např. $\mathbf{p_1}=(-1,1)$ a $\mathbf{p_2}=(1,1)$, tedy $\mathbf{p}=½(\mathbf{p_1}+\mathbf{p_2})$. Rovnice hranice v novém prostoru je pak

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

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

Zajímá nás geometrické místo těch bodů $\mathbf{x} = (x,y)$ v původním prostoru, jejichž obraz **x'** leží právě na určené lineární hranici. Vyjdeme z rovnice **(1)** a využijeme výhody „kernel triku" pro výpočet skalárního součinu (zde $\mathbf{n'}.\ \mathbf{x'} = (\mathbf{n.x})^2$). Tedy upravíme **(1)** na $½(\mathbf{p_1}.\ \mathbf{x})^2 + ½(\mathbf{p_2}.\ \mathbf{x})^2 - (\mathbf{n}\ .\ \mathbf{x})^2 = t$ **(1a)** a po dosazení hodnot souřadnic bodů **x** , $\mathbf{p_1}$, $\mathbf{p_2}$ a **n** dostáváme:

$½(-x+y)^2 + ½(x+y)^2 – (0.\ x+0.y)^2 = t$ čili $x^2 + y^2 = t$, což je právě rovnice pro kruhovou hranici v původním prostoru !

Nature Inspired Technologies Group