Politechnika Poznańska
Wydział Informatyki i Zarządzania
Instytut Informatyki

Praca dyplomowa magisterska

OPTYMALIZACJA KLASYFIKATORA SVM ZA POMOCĄ PROGRAMOWANIA GENETYCZNEGO

Tomasz Ziętkiewicz

Promotor
dr hab. Krzysztof Krawiec

Poznań, 2012

Tutaj przychodzi karta pracy dyplomowej;
oryginał wstawiamy do wersji dla archiwum PP, w pozostałych kopiach wstawiamy ksero.

Spis treści

Rozdział 1

Wprowadzenie

1.1 Cel i zakres pracy

Niniejsza praca ma dwa podstawowe cele:

- Stworzenie algorytmu programowania genetycznego optymalizującego parametry klasyfikatora SVM
- Zastosowanie stworzonego algorytmu do klasyfikacji danych ze zbioru ADHD-200

Realizacja drugiego z powyższych celów służyć ma przede wszystkim sprawdzeniu efektywności stworzonego algorytmu, ale jest też wyzwaniem samym w sobie. Zbiór danych ADHD-200 nie poddaje się łatwo klasyfikacji za pomocą metod uczenia maszynowego, dlatego każda poprawa wyników klasyfikacji względem wyników dotychczas osiąganych będzie sporym sukcesem.

1.2 Struktura pracy

Struktura pracy jest następująca: rozdział drugi przedstawia ważniejsze zagadnienia teoretyczne związane z pracą oraz zawiera przegląd literatury. W rozdziale trzecim opisano zaimplementowany algorytm Kernel GP oraz przedstawiono sposób jego implementacji. Rozdział czwarty przedstawia wyniki działania algorytmu na standardowych zbiorach danych używanych do testowania algorytmów maszynowego uczenia. W rozdziale piątym prezentowane są wyniki działania algorytmu na zbiorze ADHD-200. Rozdział szósty zawiera podsumowanie.

Rozdział 2

Podstawy teoretyczne

2.1 Uczenie maszynowe

Uczenie maszynowe (ang. *Machine Learning*) to dziedzina informatyki zajmująca się konstruowaniem *systemów uczących się* [KS03]. Zdefiniowanie *systemu uczącego* nie jest zadaniem trywialnym, jednak wydaje się, że podstawową cechą takich systemów jest to, że potrafią one dostosowywać sposób swojego działania do danych wejściowych, na których operują. Zmiana działania systemu może mieć różną skalę - od zmiany pojedynczych parametrów programu, przez zapamiętywanie informacji po zmianę wykonywanego algorytmu. Niezależnie od skali każda taka zmiana powinna mieć wpływ na jego przyszłe działanie i powinna mieć na celu uzyskanie jak najwyższej *oceny* pracy systemu. Funkcja oceny uczącego się systemu jest od niego niezależna, ale musi mieć on dostęp do jej wartości. Dostosowanie sposobu działania, nie zaś samego działania, w ten sposób, żeby zostało ono jak najwyżej ocenione wydaje się być cechą charakterystyczną systemów uczących się. Wszak przecież nawet prosty kalkulator dostosowuje swoje działanie (wyświetlany wynik) do danych wejściowych, jednak sposób działania pozostaje niezmienny - po wprowadzeniu tych samych danych wejściowych zawsze otrzymamy ten sam wynik. Gdyby w arytmetyce nastąpił nagle przełom, kalkulator nie potrafiłby dostosować sposobu swojego działania do nowych reguł arytmetyki, przez co zostałby albo zmodyfikowany przez człowieka, albo po prostu wyrzucony. Porównanie systemów uczących się do kalkulatora nie jest bynajmniej tak abstrakcyjne jak mogłoby się wydawać - ostatecznie najbardziej wyrafinowany system uczący też wykonuje pewną deterministyczną funkcję na danych wejściowych, jednak proces obliczania wyniku może być rozłożony w czasie - jako dane wejściowe można traktować zarówno dane użyte do uczenia systemu, jego oceny jak i dane aktualnie do niego wprowadzane.

Systemy uczące się mają wiele zastosowań, między innymi:

- Rozpoznawanie mowy ludzkiej
- Rozpoznawanie tekstu pisanego (*OCR*, ang. *Optical Character Recognition*
- Diagnostyka medyczna
- Klasyfikacja tekstów, np. na potrzeby filtrowania niechcianych wiadomości
- Automatyczna identyfikacja zagrożeń na podstawie obrazu z kamer przemysłowych
- Kierowanie autonomicznymi pojazdami
- Prognozowanie pogody
- Prognozowanie zmian kursów akcji na giełdzie

- Wykrywanie podejrzanych transakcji finansowych
- Biometria - identyfikacja ludzi na podstawie cech takich jak głos, wygląd twarzy, odciski palców, sposób chodzenia
- Wspomaganie podejmowania decyzji

Jednym z rodzajów systemów uczących są systemy klasyfikujące.

- *zbiór uczący*
- *zbiór testujący*
- *zbiór walidujący*
- *walidacja krzyżowa*
- *trafność*

2.1.1 SVM

Maszyna wektorów wspierających (*SVM*, ang. *Support Vector Machine*)

- *funkcja jądrowa*
- *wektor wspierający*
- *hiperpłaszczyzna*
-
-

2.2 Obliczenia ewolucyjne

- *populacja*
- *osobnik*
- *mutacja*
- *krzyżowanie*
- *selekcja*
- *funkcja przystosowania* (ang. *fitness*)

2.2.1 Programowanie genetyczne

Programowanie genetyczne (*GP*, ang. *Genetic Programming*) to

Funkcje, które generuje algorytm programowania genetycznego są w nim reprezentowane w postaci drzew. Węzłami takiego drzewa są elementarne funkcje zadeklarowane w kodzie programu. Każda z takich funkcji ma przypisane pewne ograniczenia co do ilości i typu argumentów, które przyjmuje oraz co do typu wartości, który zwraca. Drzewo jako całość również ma zadeklarowany typ zwracanej wartości.

2.3 Ewolucja kerneli

2.4 Obrazowanie mózgu przy pomocy rezonansu magnetycznego

- *Obrazowanie metodą rezonansu magnetycznego* (*MRI,* ang. *Magnetic Resonance Imaging*)
- *Obrazowanie metodą funkcjonalnego rezonansu magnetycznego* (*FMRI,* ang. *functional Magnetic Resonance Imaging*)

Rozdział 3

Algorytm Kernel GP

3.1 Opis algorytmu

Jedną z trudności, która wiąże się z używaniem klasyfikatora SVM jest dobór odpowiedniej do zbioru danych *funkcji jądrowej*. Wymaga to doświadczenia lub przebiega na zasadzie prób i błędów. Ponadto zbiór powszechnie używanych funkcji jest ubogi - zazwyczaj ogranicza się do trzech podstawowych funkcji. Oprócz wyboru funkcji konieczne jest również ustawienie odpowiednich wartości ich parametrów.

Celem algorytmu Kernel GP jest odnalezienie optymalnej dla danego problemu funkcji jądrowej wraz z jej parametrami. Dzięki opisanej w poprzednim rozdziale własności domknięcia zbioru kerneli ze względu na pewne operacje arytmetyczne możliwe jest tworzenie nieograniczonej ilości dowolnie złożonych funkcji na podstawie kilku podstawowych kerneli. Opisywany algorytm przeszukuje przestrzeń takich funkcji za pomocą *programowania genetycznego*. Szukana jest taka funkcja, przy której użyciu klasyfikator SVM osiągnie największą *dokładność* (*accuracy*) klasyfikacji.

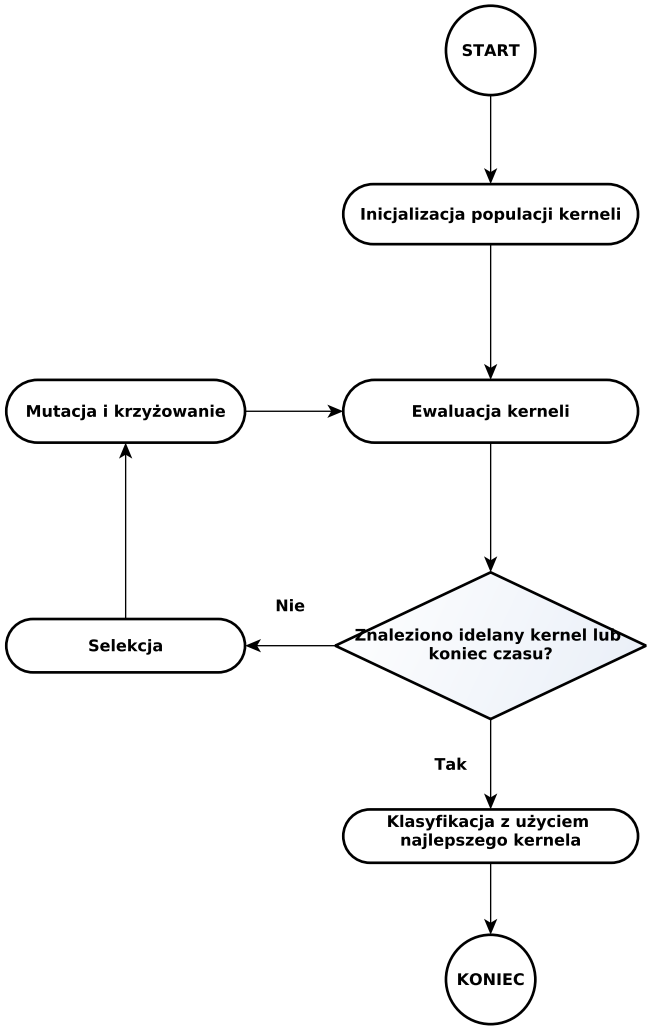
Przebieg algorytmu jest typowy dla algorytmów genetycznych:

1. Utwórz początkową populację kerneli
2. Oblicz wartość *funkcji dopasowania* każdego z kerneli: dokładność klasyfikacji SVM z użyciem tego kernela
3. Jeśli znaleziono idealny kernel (dokładność klasyfikacji 100) lub skończył się czas, użyj tego kernela do klasyfikacji zbioru walidującego, zwróć wyniki klasyfikacji i zakończ algorytm.
4. Dokonaj selekcji najlepszych funkcji z populacji
5. Utwórz nową populację poprzez mutację i krzyżowanie wybranych w poprzednim kroku funkcji
6. Wróć do punktu 2

Algorytm pokazano również na diagramie przepływu na rycinie 3.1. Poszczególne kroki algorytmu zostaną opisane poniżej.

3.1.1 Inicjalizacja populacji

Podczas inicjalizacji początkowo pusta populacja jest zapełniana przez generowane w sposób losowy drzewa reprezentujące funkcje. Generowane drzewa muszą być poprawne, czyli spełniać narzucone ograniczenia na głębokość drzewa, liczbę węzłów, typ wartości zwracanych przez drzewo. Wielkość populacji jest jednym z parametrów algorytmu. Zbyt mała populacja powoduje losowe zawężenie



RYSUNEK 3.1: Diagram przepływu algorytmu Kernel GP.

przeszukiwanej przestrzeni i zmniejsza prawdopodobieństwo znalezienia optymalnej funkcji. Z drugiej strony zbyt duża wielkość populacji upodabnia algorytm genetyczny do pełnego przeszukiwania, co oczywiście zwiększa szanse znalezienia optymalnego kernela, ale wydłuża czas działania algorytmu.

Generowanie funkcji

Generowanie drzew reprezentujących funkcje jądrowe polega na łączeniu ze sobą funkcji elementarnych zgodnie z przypisanymi im ograniczeniami. Funkcje elementarne wraz z ograniczeniami zdefiniowane w algorytmie:

- Funkcje łączące - jako argument przyjmują wynik dwóch lub jednej funkcji jądrowej i ewentualnie stałą ERC. Zwracają wartość rzeczywistą. Dzięki właściwości domknięcia zbioru kerneli ze względu na operacje wykonywane przez te funkcje funkcja powstała przez połączenie dwóch kerneli funkcją łączącą jest również poprawnym kernelem [STC04].
  - Dodawanie: $k(x,z) = k_1(x,z) + k_2(x,z)$
  - Mnożenie: $k(x,z) = k_1(x,z) * k_2(x,z)$
  - Mnożenie przez stałą: $k(x,z) = a * k_1(x,z)$

  - Funkcja wykładnicza: $k(x,z) = e^{k_1(x,z)}$

  Gdzie a to stała rzeczywista generowana jako stała ERC.

- Podstawowe funkcje jądrowe - jako argument przyjmują odpowiednią do funkcji liczbę stałych ERC. Zwracają wartość rzeczywistą.

  - Liniowa: $k(x,z) = \langle x,z \rangle$
  - Wielomianowa: $k(x,z) = \langle x,z \rangle^d$
  - Gausowska: $e^{-\gamma * ||x-z||^2}$
  - Sigmoidalna: $k(x,z) = \tanh(\gamma \langle x,z \rangle + \tau)$

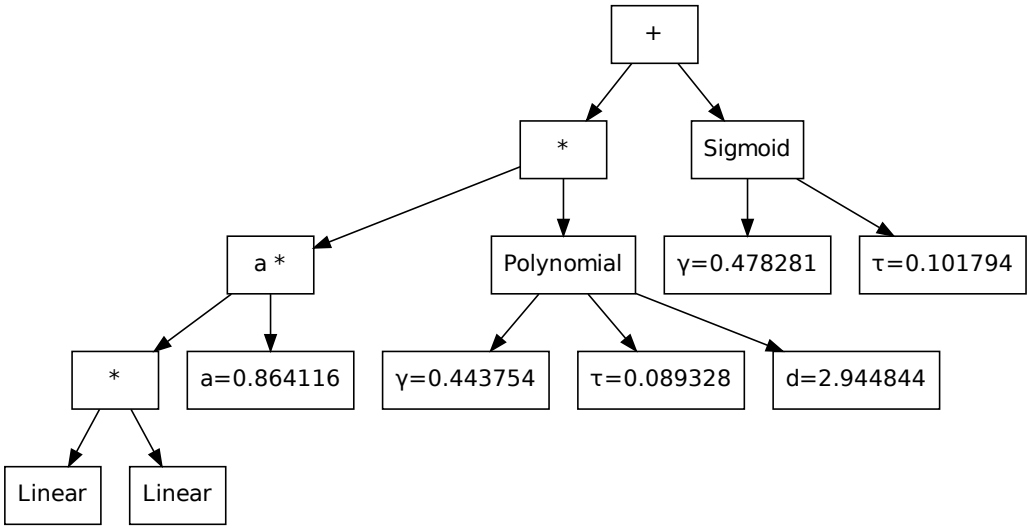
  Gdzie γ, τ oraz d to wartości stałe generowane jako stałe ERC. a $\langle x,y \rangle$ to iloczyn skalarny wektorów x i y.

- Stałe *ERC (ang. Ephemeral Random Constant)* liczby rzeczywiste lub całkowite, które służą jako parametry innych funkcji. Są one liściami w drzewie, nie przyjmują żadnych argumentów. Mogą losowo zmieniać swoją wartość podczas mutacji.

  - γ: liczba rzeczywista z zakresu
  - τ: liczba rzeczywista z zakresu
  - d: liczba całkowita z zakresu
  - a: liczba rzeczywista z zakresu

Przykładowe drzewo wygenerowane przez algorytm pokazana na ryc.3.2.

Wektory cech będące najważniejszymi argumentami funkcji jądrowych nie są wyodrębnione jako osobne funkcje budujące drzewo.



RYSUNEK 3.2: Przykładowe drzewo generowane przez algorytm.

3.1.2 Ewaluacja kerneli

Ewaluacja funkcji jądrowej może odbywać się na jeden z dwóch sposobów. Jeśli w zbiorze danych oprócz zbioru uczącego wydzielono zbiory testowy i walidujący, to sprawdzany kernel jest używany do klasyfikacji danych ze zbioru testującego. Trafność klasyfikacji zostaje przeliczona na wartość *funkcji przystosowania* ewaluowanej funkcji jądrowej. Jeśli w zbiorze danych wydzielono tylko dwa podzbiory: uczący i walidujący, to zdolność klasyfikacji przez kernel jest oceniana za pomocą *walidacji krzyżowej (ang. cross-validation.* Walidacja krzyżowa pozwala użyć więcej danych podczas fazy uczenia, jednak wiąże się ze znacznym wzrostem złożoności obliczeniowej - zamiast jednej klasyfikacji musimy przeprowadzić k procesów uczenia i k klasyfikacji.

3.1.3 Selekcja

Jednym z problemów programowania genetycznego jest to, że drzewa powstałe w wyniku procesu ewolucyjnego mogą być bardzo duże, co nie jest pożądaną cechą - większe drzewo dłużej oblicza zwracaną wartość, zajmuje więcej miejsc w pamięci. Dlatego wielkość drzew należy ograniczać, jeśli wzrost drzewa nie prowadzi do zwiększenia wartości funkcji dopasowania. Wielkość generowanych drzew jest regulowana przez dwa mechanizmy. Pierwszy to proste ograniczenie na maksymalną głębokość drzewa. Wartość tę ustawiono na 6 - drzewa o większej głebokości nie zostaną w ogóle wygenerowane przez podczas inicajlizacji populacji czy podczas krzyżowania i mutacji. Drugi mechanizm, o angielskiej nazwie *parsimony pressure*, promuje mniejsze drzewa podczas selekcji. W tym celu stosowany jest algorytm selekcji turniejowej leksykograficznej z koszykami (ang. Bucket Lexicographic Tournament Selection). Algorytm ten sortuje populację według przystosowania osobników, następnie grupuje je w N "koszyki". Następnie selekcja przebiega według zasad selekcji turniejowej, z tym, że porównuje się nie przystosowanie osobników, ale koszyk, do którego są przypisane. W przypadku gdy w turnieju porównywane są dwa osobniki z tego samego koszyka wygrywa ten, który jest mniejszy.

3.1.4 Krzyżowanie i mutacja

Krzyżowanie polega na odcięciu dwóch losowych poddrzew z dwóch różnych osobników i zamianie ich miejscami. Wygenerowane w ten sposób drzewo musi spełniać narzucone na drzewo ograniczenia dotyczące typów i wielkości. Mutacja drzew polega na zamianie losowo wybranego poddrzewa przez losowo wygenerowane drzewo. Dodatkowo mutowane są również węzły ERC. Ich mutacja polega na dodaniu losowej wartości o rozkładzie normalnym do wartości przechowywanej w węźle. Wartość ta może być ujemna lub dodatnia.

3.1.5 Walidacja rozwiązania

Walidacja polega na użyciu najlepszego znalezionego Kernela do klasyfikacji przykładów ze zbioru walidującego, który nie był używany podczas uczenia klasyfikatora SVM ani podczas ewaluacji kerneli. Otrzymana w wyniku tej klasyfikacji trafność jest miarą oceny całego algorytmu Kernel GP.

3.2 Implementacja

Algorytm został napisany w języku Java z użyciem bibliotek *ECJ (Evolutionary Computing in Java)* [Sea10] oraz LibSVM [CL11]. Pierwsza z nich dostarcza mechanizmy *obliczeń ewolucyjnych* w tym *programowania genetycznego.* LibSVM to klasyfikator SVM napisany oryginalnie w języku C z dostępną implementacją w Javie. Mechanizmy ECJ stanowią trzon algorytmu zapewniając tworzenie populacji

funkcji, ich selekcję, mutację oraz krzyżowanie. LibSVM został użyty na etapie ewaluacji wygenerowanych przez ECJ funkcji.

3.3 Złożoność obliczeniowa

Rozdział 4

Wyniki działania algorytmu na popularnych zbiorach danych

4.1 Metodologia pomiarów

4.2 Trafność klasyfikacji

4.3 Czas wykonania

4.4 Użycie pamięci

Rozdział 5

Case study - klasyfikacja danych ADHD 200

ADHD 200 był międzynarodowym konkursem, który zakończył się we wrześniu 2011 roku. Dzięki współpracy ośmiu szpitali i ośrodków naukowych z całego świata w ramach konkursu udostępniono zbiór zawierające dane medyczne 776 dzieci, z czego 285 z ADHD. Zadaniem uczestników konkursu było skonstruowanie klasyfikatora diagnozującego ADHD na podstawie tych danych. Zbiór testowy zawierał dane xxx dzieci, których danych nie było w zbiorze uczącym, bez podanej diagnozy. Celem skonstruowanego klasyfikatora było przypisanie diagnozy do przykładów ze zbioru testującego.

Wyniki konkursu pokazały, że zbiór danych był trudny w klasyfikacji. Największa osiągnięta trafność klasyfikacji wyniosła 60.51% (szczegółowe wyniki dostępne na stronie konkursu: [B].

5.1 Opis zbioru danych

5.1.1 Surowe dane

Dane dostarczone przez organizatorów konkursu składają się z:

- Danych klinicznych:
  - Płeć
  - Wiek
  - Współczynnik IQ
  - Prawo/lewo ręczność
- Danych obrazowych:
  - Strukturalnych - dane pochodzące z obrazowania rezonansu magnetycznego (*MRI*, ang. *Magnetic Resonance Imaging*). Są to trójwymiarowe obrazy o rozdzielczości ok. 250x250x250 punktów, obrazujące strukturę mózgu osoby badanej
  - Funkcjonalnych - dane pochodzące z obrazowania funkcjonalnego rezonansu magnetycznego (*FMRI*, ang. *functional Magnetic Resonance Imaging*) będące sekwencją ok 120 trójwymiarowych obrazów o rozdzielczości ok 250x250x250 punktów, obrazującą aktywność mózgu osoby badanej.

5.1.2 Preprocessing

5.2 Konstrukcja i selekcja cech

5.3 Wyniki klasyfikacji

5.3.1 Kernel GP

5.3.2 Porównanie z innymi algorytmami

SVM

Inne klasyfikatory

Rozdział 6

Podsumowanie

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Nulla purus purus, fermentum in condimentum nec, sodales nec enim. Fusce auctor auctor porta. Proin tempus lacinia tortor, eget aliquam ante condimentum id. Morbi viverra congue posuere. Nunc non odio eros, sollicitudin pulvinar metus. Sed eget ligula ligula, a congue orci. Proin laoreet aliquet vulputate. Vivamus ut enim sed diam pretium fringilla. Class aptent taciti sociosqu ad litora torquent per conubia nostra, per inceptos himenaeos. Etiam convallis mi nec dolor pretium sed aliquam orci sagittis. Maecenas aliquam dictum neque vel mollis. Morbi vel vehicula mauris.

Literatura

[CL11] Chih-Chung Chang, Chih-Jen Lin. LIBSVM: a library for support vector machines. *ACM Trans. Intell. Syst. Technol.*, 2(3):27:1–27:27, Maj 2011.

[KS03] K. Krawiec, J. Stefanowski. *Uczenie maszynowe i sieci neuronowe*. Wydaw. Politechniki Poznańskiej, 2003.

[Sea10] Luke Sean. *The ECJ Owner's Manual*. Yale Univ Pr, Pa/xdziernik 2010.

[STC04] John Shawe-Taylor, Nello Cristianini. *Kernel Methods for Pattern Analysis*. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2004.

Zasoby internetowe

[A] ECJ
http://cs.gmu.edu/~eclab/projects/ecj/

[B] ADHD 200
http://fcon_1000.projects.nitrc.org/indi/adhd200/

Instytut Informatyki, Wydział Informatyki i Zarządzania
Politechnika Poznańska

Skład przy użyciu systemu LaTeX.

BibTeX:

```
@mastersthesis{ mnowak-masterthesis,
    author = "Tomasz Ziętkiewicz",
    title = "{Optymalizacja klasyfikatora SVM za pomocą programowania genetycznego}",
    school = "Poznan University of Technology",
    address = "Pozna{\'n}, Poland",
    year = "2012",
}
```