Binárna Klasifikácia pomocou LP

Dávid Daniš, Michal Chymo, Maximilián Zivák, Adam Chrenko

December 2021

1 Popis Problému

Aj keď problém binárnej klasifikácie bol formulovaný len "nedávno", tento typ rozhodovania je s nami prakticky celú existenciu inteligencie - [Nepriateľ,Spojenec],[Živočích nebezpečný, alebo nie]. Ide vlastne o veľmi jednoduché rozhodnutie {Áno,Nie} tzv. Binárnu(2 možnosti) Klasifikáciu. Klasifikovať je možné prakticky čokoľvek ak je možné informáciu rozdeliť na dostatočne jednoznačné "triedy".
Kde do toho vchádza lineárne programovanie - Je možné naformulovať úlohu LP tak, aby sme našli nadrovinu, ktorá čo najlepšie rozdeľuje dané dáta.

2 Dôkaz ekvivalencie

Ak $\forall x, y\ \exists a, b$ také, že:

$$a^T x - b > 0$$
$$a^T y - b < 0$$

Potom:

$$\begin{aligned} &nech\ R\ = \{(a^T x - b) \mid x \in X\} \\ &nech\ F\ = \{-(a^T y - b) \mid y \in Y\} \\ &nech\ k = \frac{1}{minimum(F \cup R)} \qquad kde\ 1\ je\ ľubovolná\ konštanta \end{aligned}$$

Z definície k vieme, že $k > 0$ a platí:

$$\begin{aligned} k(a^T x - b) &\geq 1 && x \in X \\ k(a^T y - b) &\leq -1 && y \in Y \end{aligned}$$

Dôkaz že predošlé dva riadky platia nechávame ako cvičenie pre čitateľa.
Z čoho vyplýva, že existujú $a' = ka$, $b' = kb$ také, že:

$$a'^T x - b' \geq 1$$

$$a'^T y - b' \leq -1$$

3 Konštantná účelová funkcia

Vyberme $\vec{a}$, b tak, že

$$\vec{a}^T \vec{x_i} - b \geq 1, \quad \forall i \in 1, 2, 3 \ldots N \qquad \vec{a}^T \vec{y_i} - b \leq -1, \quad \forall i \in 1, 2, 3 \ldots M$$

Toto potrebujeme dostať do tvaru úlohy LP, tak že

$$\min_{\vec{p}} \vec{c}^T \vec{p}$$

$$A_{ub}\vec{p} \leq \vec{b}_{ub}$$
$$kde \quad \vec{p} = [a_1, a_2 \dots a_n, b]^T$$

Za $\vec{c}$ si dosadíme $\vec{0}$ a teda účelovú funkciu môžeme zatial ignorovať.
Zároveň skalár **b** je niekoľkými krokmi možné "skryť"do vektorov $x_i, y_i \, \forall i \in 1, 2, 3 \dots N = M$ a teda do matice $\mathbf{A_{ub}}$.
Do vektorov x_i, y_i pridáme na koniec matice riadok samých -1, tieto matice označíme $\mathbf{X'}, \mathbf{Y'}$. Potom tieto matice transponujeme, čiže výsledok úlohy LP bude vektor, pre ktorý platí $|\mathbf{v}| = \mathbf{n+1}$ kde $n+1$ hodnota určí hodnodu skaláru **b** a prvých n hodnôt určí koeficienty hľadaného vektora $\vec{a}$.

Úlohu potrebujeme dostať do štandardizovaného tvaru pre počítanie na PC: $LHS \leq RHS$.
Takže maticu $\mathbf{X'}$ prenásobíme -1 a za vektor **b** dosadiť samé -1. Tieto 2 matice $(\mathbf{X'}, \mathbf{Y'})$ spojíme do jednej nasledovne:

$$A_{ub} = \left[\begin{array}{c} -X'^T \\ \hline Y'^T \end{array}\right] \qquad b_{ub} = (-1 \dots -1)^T$$

$$-X'^T = \begin{bmatrix} -x_{1,1} & -x_{1,2} & \dots & -x_{1,50} & 1 \\ -x_{2,1} & -x_{2,2} & \dots & -x_{2,50} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -x_{50,1} & -x_{50,2} & \dots & -x_{50,50} & 1 \end{bmatrix} \qquad Y'^T = \begin{bmatrix} y_{1,1} & y_{1,2} & \dots & y_{1,50} & -1 \\ y_{2,1} & y_{2,2} & \dots & y_{2,50} & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ y_{50,1} & y_{50,2} & \dots & y_{50,50} & -1 \end{bmatrix}$$

Úlohu v tomto tvare je možné dosadiť do vášho obľúbeného programu na riešenie lineárnej optimalizácie. (SciPy, MatLab ...).

$$A_{ub} * [a_1, a_2 \dots a_n, b]^T \leq \vec{b}_{ub}$$

Toto riešenie porovnáme pri použití rôznych metód

4 L1 norma

LP s nulovou účelovou funkciou nájde ľubuvolnú nadrovinu. Chceli by sme ale odstrániť nesignifikantné parametre. Ak účelovú funkciu zameníme za L_1 normu $\vec{a}$, dostaneme riešenie s veľkým počtom nulových zložiek. Nový problém LP je tvaru:

$$\min_a ||a||_1$$
$$A_{ub} * \vec{p} \leq \vec{b}_{ub}$$
$$kde \quad \vec{p} = [a_1, a_2 \dots a_n, b]^T$$

Čo je:

$$\min_a \sum_{i=1}^{n} |a_i|$$
$$A_{ub} * \vec{p} \leq \vec{b}_{ub}$$

Keďže účelová funkcia LP v štandardnom tvare musí byť lineárna, odstránime absolútnu hodnotu štandardným spôsobom pomocou novej premennej $\vec{t}$

$$\min_a \sum_{i=1}^{n} |a_i| \quad \rightarrow \quad \min_t \sum_{i=1}^{n} t_i$$

$$-t_i \leq a_i \leq t_i \quad i \in \{1, 2, ..., n\}, \quad t_i \in [0, \infty)$$
$$-t_i \leq a_i \quad a_i \leq t_i$$

$$-I_n a - I_n t \leq \vec{0}$$
$$I_n a - I_n t \leq \vec{0}$$

A teda nová úloha LP je:

$$\min_t \sum_{i=1}^{n} t_i = \vec{1}_n^T * \vec{t}$$
$$A_{ub} * \vec{p} \leq \vec{b}_{ub}$$
$$-I_n a - I_n t \leq \vec{0}_n$$
$$I_n a - I_n t \leq \vec{0}_n$$

Na prepísanie do formy s jedným vektorom neznámich a jednou maticou musíme spraviť pár úprav. Chceli by sme aby hodnoty a_i a b neovplyňovali hodnotu účelovej funkcie, čiže je nutné dosadiť za ich koeficienty nuly, zárovneň potrebujeme aby t_i(čo sú nové neznáme) všetky prispievali rovným dielom.
Maticu A je nutné rozšíriť o nulové a jednotkové matice, aby sme zachovali dimenzie, keďže chceme aby nám po násobení matice a vektoru vyšiel vektor dĺžky $k + 2n$.
Pravú stranu nerovnice musíme upraviť podobným spôsobom, tentokrát to dosiahneme rozšírením vektoru na pravej strane, nulovým vektorom dĺžky $2n$.Týmito úpravami docielimi toho, že LP nájde vektor ktorého prvých n členov je hľadaný vektor, a $n + 1$ člen je hľadaný skalár, ostatné prvky vektoru ignorujeme.

$$\min_y q^T y$$

$$q = [0_1, 0_2 \ldots 0_{n+1} | 1_1, 1_2 \ldots 1_n] \qquad y = [a_1, a_2 \ldots, a_n | b | t_1, t_2 \ldots t_n]$$

$$\begin{bmatrix} A_{k,n} & -\vec{1}_k & -0_{k,n} \\ I_{n,n} & -\vec{0}_k & -I_{n,n} \\ -I_{n,n} & -\vec{0}_k & -I_{n,n} \end{bmatrix} * \left[\begin{array}{c} a_1 \\ \vdots \\ a_n \\ \hline b \\ \hline t_1 \\ \vdots \\ t_n \end{array}\right] \leq \left[\begin{array}{c} -1_1 \\ \vdots \\ -1_k \\ \hline 0_1 \\ \vdots \\ 0_{2n} \end{array}\right] \qquad k = N + M$$

Kde $A_{k,n}$ je A_{ub} bez posledného stĺpca.
V tejto forme je možné nerovnicu dosadiť do $< Algoritmu >$ na riešenie problémov LP.

Z vačsiny Algoritmov sa dozvieme, že viac ako polovica "parametrov(features)"je nesignifikantných. $(\leq \epsilon)$

5 Využitia Binárnej Klasifikácie

- Binárna klasifikácia sama o sebe má využitia:
  - V medicíne na determináciu určitej choroby pacienta
    Najznámejší príklad pochádza z USA, kde výskumníci z Michigan Technical university vyvinuli algoritmus na klasifikáciu nádorov rakoviny prsníka. Tento model pomáha doktorom pri diagnostike
  - Kontrola kvality v priemysle (či sú určité špecifikácie splnené)
  - Vyhľadávanie digitálnych informácii (či má byť stránka vo výslednej skupine vyhľadávania alebo nie)
  - Všeobecne diskretizácia spojitej premennej, funkcie do dvoch rozdelených skupín
- Známe modely využivajúce binárnu klasifikáciu:
  - Rozhodovacie stromy - jeden z prístupov prediktívneho modelovania používaných v štatistike, dolovaní údajov a strojovom učení(zo získaných informácii určujú hodnoty premenných)
  - Náhodné lesy - predstavujú súbor metód učenia pre klasifikáciu, regresiu a iné úlohy, prekonajú rozhodovacie stromy, ale sú menej presné
  - Bayesove siete - je pravdepodobnostný grafický model, ktorý predstavuje množinu premenných a ich podmienených závislostí prostredníctvom orientovaného acyklického grafu
  - SVM - v strojovom učení, sú to modely s pridruženými algoritmami učenia, ktoré analyzujú údaje na klasifikáciu a regresnú analýzu.
  - Neuronové siete - je to buď biologická neurónová sieť zložená z biologických neurónov, alebo umelá neurónová sieť na riešenie problémov umelej inteligencie (AI)
  - Logistická regresia - V štatistike sa logistický model (alebo logitový model) používa na modelovanie pravdepodobnosti určitej triedy alebo existencie udalosti, ako napríklad úspech/neúspech, víťazstvo/prehra, živý/mŕtvy alebo zdravý/chorý.
  - Probitový model - V štatistike je probitový model typom regresie, kde závislá premenná môže nadobúdať iba dve hodnoty, napr. oženený alebo slobodný.
- Použitie viacerých binárnych klasifikátorov ako jeden multiKlasifikátor - OnevsRest/OnevsOne
  - multiKlasifikátor robí presne to, čo napovedá názov - klasifikuje viac ako 2 "triedy". Tento klasifikátor je tak zvaná heuristika na rozdelenie problému s viacerými triedami do viac problémov s dvoma triedami, na ktoré je potom možné aplikovať metódy a algoritmy binárnej klasifikácie.
  - OnevsRest - Tak zvaný naivný prístup - Buď si to čo hľadám alebo nie, všetky "triedy", sú zlúčené do rest porcie. Takto sa pozrieme na každú triedu a vyberieme ten z najlepším skóre.
  - OnevsOne - Veľkostne zložitý model - pre každý pár je nutné vytvoriť nový model. Počet týchto modelov rastie kvadraticky od počtu "tried". Zároveň ale veľmi rýchly, jednotlivé klasifikácie zaberajú len veľmi málo času.

6 Nadstavba - Reálne Dáta

Dáta boli vybrané z odporúčaného zdroja, Téma je klasifikácia falošnosti Euro bankoviek na základe 4 parametrov získaných z bankovky. Dáta boli rozdelené na training a test set v pomere 75/25%

6.1 "Konštantná" účelová funkcia

X = Pravé bankovky, Y = falošné bankovky - Obe z training setu
Keďže si nie sme istý či dáta sú separovatelné musíme pridať 2 ďalšie premenné, ktoré túto separáciu umožnia. S týmito premennými bude úloha vždy riešitená, ak tieto premenné budú dosť veľké. Ale čím vačsie sú tieto premenné tým horšiu separáciu budeme mať. Z tohto dôvodu by sme ich chceli minimalizovať. Preto upravíme účelovú funkciu na

$$\min_{u,v} \sum_{i=1}^{N} u_i + \sum_{i=1}^{M} v_i$$

Budeme musieť tak tiež upraviť ohraničenia tak aby ich bolo možné dosadiť do algoritmu, na to je potrebné použiť postup z 3 kapitoly.

Z toho dostaneme, že úloha vyzerá nasledovne

$$\begin{bmatrix} -X_{|a|,|X|} & \vec{1} & I_{|X|} & 0_{|Y|,|X|} \\ Y_{|a|,|Y|} & -\vec{1} & 0_{|X|,|Y|} & I_{|Y|} \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_4 \\ \hline b \\ \hline u_1 \\ \vdots \\ u_{|X|} \\ \hline v_1 \\ \vdots \\ v_{|Y|} \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} \vec{0}_{|a|} \\ \hline 0 \\ \hline -\vec{1}_{|X|} \\ \hline -\vec{1}_{|Y|} \end{bmatrix}$$

Po dosadení tejto úlohy do viacerých algoritmov, dostávame prakticky rovnaké výsledky pre vektor $\vec{a}$ a skalár b.

Po otestovaní na sade dát, ktorá bola na to odložená dostávame presnosť klasifikácie $\approx 92.71\%$

6.2 L1 norma

Pre použitie L1 normy je nutné znova predchádzajúcu maticu pretransformovať z pomocou štandardných techník na odstraňovanie L1 noriem. Postupom podobným posutupu využitému v Kapitole 4 dostávame účelovu funkciu

$$\min_{u,v} \sum_{i=1}^{N} u_i + \sum_{i=1}^{M} v_i + \mu||a_i||_1$$

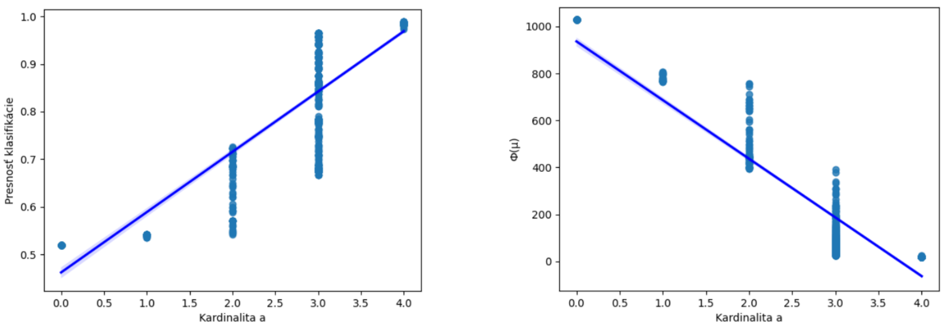
a obrovskú maticu v tvare:

$$\begin{bmatrix} -X_{|a|,|X|} & \vec{1} & 0_{|a|,|X|} & I_{|X|} & 0_{|Y|,|X|} \\ Y_{|a|,|Y|} & \vec{-1} & 0_{|a|,|Y|} & 0_{|X|,|Y|} & I_{|Y|} \\ I_{|a|} & \vec{0} & -I_{|a|} & 0_{|a|,|X|} & 0_{|a|,|Y|} \\ -I_{|a|} & \vec{0} & -I_{|a|} & 0_{|a|,|X|} & 0_{|a|,|Y|} \end{bmatrix} * \left[\begin{array}{c} a_1 \\ \vdots \\ a_4 \\ \hline b \\ \hline \mu t_1 \\ \vdots \\ \mu t_4 \\ \hline u_1 \\ \vdots \\ u_{|X|} \\ \hline v_1 \\ \vdots \\ v_{|Y|} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} \vec{0}_{|a|} \\ \hline 0 \\ \hline \vec{-1}_{|X|} \\ \hline \vec{-1}_{|Y|} \\ \hline 0_1 \\ \vdots \\ 0_{2|a|} \end{array}\right]$$

Po dosadení tejto úlohy do viacerých algoritmov, dostávame prakticky rovnaké výsledky pre vektor $\vec{a}$ a skalár b.

Po otestovaní na sade dát, ktorá bola na to odložená a $\mu = 0.1$ dostávame presnosť klasifikácie $\approx 99.75\%$

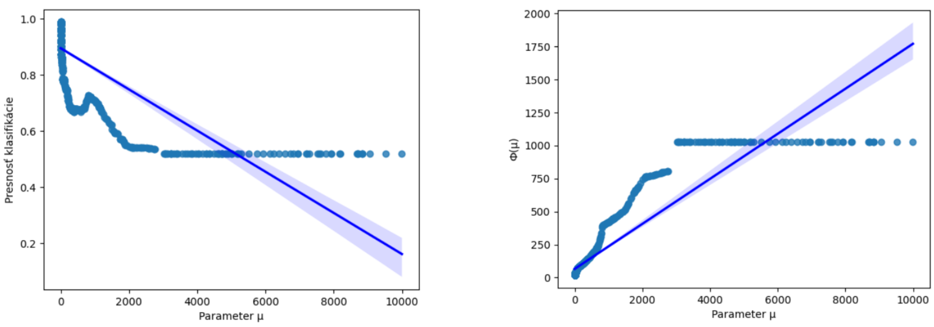
Keďže naša nová premenná je premenná, čo sa stane ak skúsime rôzne hodnoty ? Po dosadení 1000 hodnot z intervalu $[0.01, 10000]$ získavame prehľad o tom čo sa deje pri zvyšovaní μ.
Presnosť klasifikácie klesá a veľkosť $\vec{u}$,$\vec{v}$ narastá. Taktiež so zvyšujúcim sa μ klesá počet signifikantných premenných. Kedže μ a kardinalita a sú závislé tak vieme vyvodiť a vypozorovať, že znižujúca kardinalita má negatívny dopad na presnosť a pozitívny dopad na $\phi(\mu)$(čo je opak toho čo chceme).



(a) Kardinalita vs Presnosť

(b) Kardinalita vs Phi(μ)

Obr. 1: Vplyv Kardinality na rôzne metriky



(a) μ vs Presnosť

(b) μ vs $\phi(\mu)$

Obr. 2: Vplyv μ na rôzne metriky