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 $\forall x, y \; \exists a, b \; \text{také, že:}$

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

Potom:

$$\begin{split} nech \ R &= \{(a^Tx - b) \mid x \in X\} \\ nech \ F &= \{-(a^Ty - b) \mid y \in Y\} \\ nech \ k &= \frac{1}{minimum(F \cup R)} \quad kde \ 1 \ je \ l'ubovoln\'a \ konštanta \end{split}$$

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

$$k(a^T x - b) \ge 1$$
 $x \in X$
 $k(a^T y - b) \le -1$ $y \in Y$

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

$$a'^T x - b' \ge 1$$
$$a'^T y - b' \le -1$$

3 Konštantná účelová funkcia

Vyberme \vec{a} , b tak, že

$$\vec{a}^T \vec{x_i} - b \ge 1, \quad \forall i \in 1, 2, 3 \dots N \qquad \vec{a}^T \vec{y_i} - b \le -1, \quad \forall i \in 1, 2, 3 \dots M$$

Toto potrebujeme dostať do tvaru úlohy LP, tak že

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

$$A_{ub}\vec{p} \le \vec{b}_{ub}$$

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

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 $\mathbf{A}_{\mathbf{ub}}$.

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 $|\mathbf{v}| = \mathbf{n} + \mathbf{1}$ kde n+1 hodnota určí hodnodu skaláru \mathbf{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 \mathbf{b} dosadiť samé -1. Tieto 2 matice $(\mathbf{X}', \mathbf{Y}')$ spojíme do jednej nasledovne:

$$A_{ub} = \begin{bmatrix} -X'^T \\ Y'^T \end{bmatrix} \qquad b_{ub} = (-1 \dots -1)^T$$

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

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

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

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:

$$\min_{a} ||a||_{1}$$

$$A_{ub} * \vec{p} \le \vec{b}_{ub}$$

$$kde \quad \vec{p} = [a_{1}, a_{2} \dots a_{n}, b]^{T}$$

Čo je:

$$\min_{a} \sum_{i=1}^{n} |a_i|$$
$$A_{ub} * \vec{p} \le \vec{b}_{ub}$$

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

$$\min_{a} \sum_{i=1}^{n} |a_{i}| \rightarrow \min_{t} \sum_{i=1}^{n} t_{i}$$

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

$$-t_{i} \leq a_{i} \quad a_{i} \leq t_{i}$$

$$-I_{n}a - I_{n}t \leq \vec{0}$$

$$I_{n}a - I_{n}t \leq \vec{0}$$

A teda nová úloha LP je:

$$\min_{t} \sum_{i=1}^{n} t_i = \vec{1}_n^T * \vec{t}$$

$$A_{ub} * \vec{p} \le \vec{b}_{ub}$$

$$-I_n a - I_n t \le \vec{0}_n$$

$$I_n a - I_n t \le \vec{0}_n$$

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.

$$\begin{aligned} \min_{y} q^{T}y \\ q &= [0_{1}, 0_{2} \dots 0_{n+1} | 1_{1}, 1_{2} \dots 1_{n}] \\ \begin{bmatrix} A_{k,n} & -\vec{1}_{k} & -0_{k,n} \\ I_{n,n} & -\vec{0}_{k} & -I_{n,n} \\ -I_{n,n} & -\vec{0}_{k} & -I_{n,n} \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} a_{1} \\ \vdots \\ a_{n} \\ b \\ \hline t_{1} \\ \vdots \\ t_{n} \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} -1_{1} \\ \vdots \\ -1_{k} \\ 0_{1} \\ \vdots \\ 0_{2n} \end{bmatrix} & k = N + M \end{aligned}$$

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. TMTO v akcii.