Машинное обучение

Лекция 5. Метод опорных векторов

Автор: Рустам Азимов

Санкт-Петербургский государственный университет

Санкт-Петербург, 2022г.

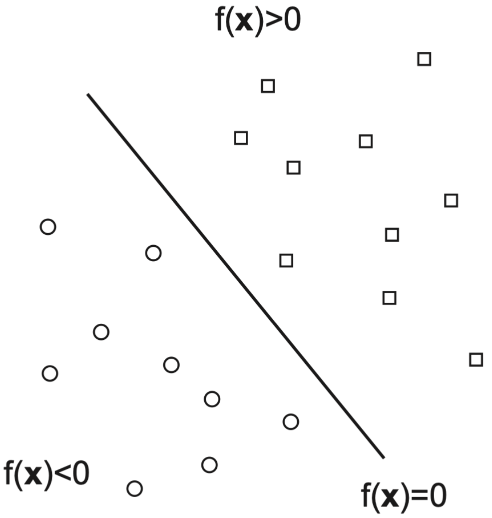
Задача бинарной классификации

- X — признаки, вещественные числа
- Целевой признак $Y \in \{-1, +1\}$
- Линейная модель для классификации:

$$f(x) = sign(\sum_{i=1}^{m} w_i x_i + b) = sign(\langle w, x \rangle + b)$$

- Разделяет пространство на две части гиперплоскостью
- Величина скалярного произведения описывает расстояние до гиперплоскости, а его знак — по какую сторону данный объект

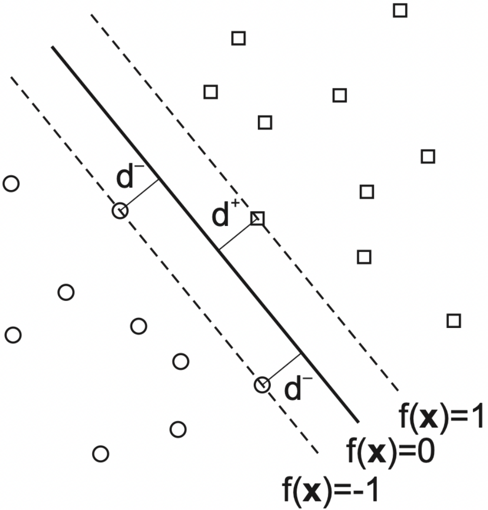
Разделяющая гиперплоскость



Разделимый случай

- Можно найти такие веса w, чтобы классификатор $f(x)$ не ошибался нигде на обучающей выборке
- В этом случае говорят, что выборка линейно разделима
- **Зазор (отступ, margin)** между классом и разделяющей гиперплоскостью — минимальное расстояние между гиперплоскостью и объектом класса
- Для наших двух классов обозначим зазор через d^+ и d^-

Зазоры



Оптимальная гиперплоскость

- В этом случае провести гиперплоскость, корректно разделяющую данные, можно разными способами
- Хотим хорошую обобщающую способность модели
- Тогда определим оптимальную гиперплоскость как гиперплоскость, максимизирующую зазор:
$$\min(d^+, d^-) \to \max_{w,b}$$
- Максимизация зазора между гиперплоскостью и данными позволяет надеяться на хорошую обобщающую способность в том случае, когда тестовая выборка является небольшой вариацией обучающей

Масштабирование

- Очевидно, что при фиксированном направлении гиперплоскости (фиксированном векторе нормали w) оптимальная гиперплоскость проходит по середине между линиями уровня до ближайших объектов классов
- Таким образом, можно считать, что

$$d^+(w) = d^-(w)$$

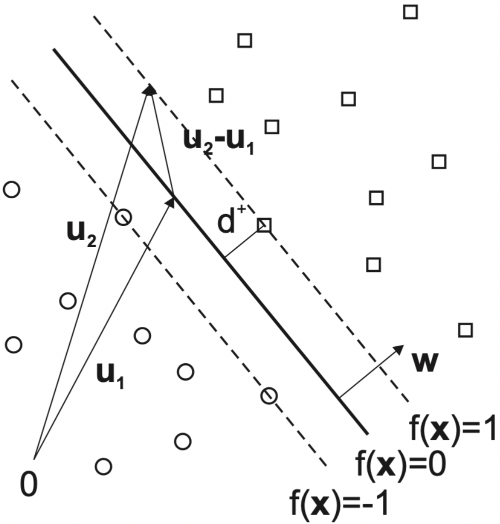
- Кроме того, гиперплоскость определена с точностью до масштаба шкалы измерения w и b
- Действительно, если умножить w и b на одно и тоже положительное число, то классификатор не изменится
- Зато перемещаются линии уровня $\langle w, x \rangle + b = a$
- Потребуем, чтобы линии уровня, проходящие через ближайшие объекты классов к гиперплоскости, определялись как $\langle w, x \rangle + b = 1$ и $\langle w, x \rangle + b = -1$

Величина зазоров

- Рассмотрим произвольный вектор u_1, принадлежащий гиперплоскости, и произвольный вектор u_2, принадлежащий линии уровня $\langle w, x \rangle + b = 1$
- Очевидно, что величина зазора d^+ равна длине проекции вектора $u_2 - u_1$ на вектор нормали w
- Таким образом, можно получить, что величина зазора

$$d^+ = d^- = \frac{1}{||w||}$$

Величина зазоров



Hard margin SVM

- Тогда запишем задачу максимизации зазора, которая и определяет **метод опорных векторов для линейно разделимой выборки (hard margin support vector machine)**

$$\begin{cases} \dfrac{2}{||w||} \to \max\limits_{w,b} \\ \langle w, x_i \rangle + b \geq 1, \quad \text{если } y_i = 1 \\ \langle w, x_i \rangle + b \leq -1, \quad \text{если } y_i = -1 \end{cases}$$

Hard margin SVM

- Тогда запишем задачу максимизации зазора, которая и определяет **метод опорных векторов для линейно разделимой выборки (hard margin support vector machine)**

$$\begin{cases} \dfrac{2}{||w||} \to \max\limits_{w,b} \\ \langle w, x_i \rangle + b \geq 1, \quad \text{если } y_i = 1 \\ \langle w, x_i \rangle + b \leq -1, \quad \text{если } y_i = -1 \end{cases}$$

- Или эквивалентная система, но более удобная и с выпуклой функцией после добавления квадрата

$$\begin{cases} \dfrac{1}{2}||w||^2 \to \min\limits_{w,b} \\ y_i\langle w, x_i \rangle + b \geq 1 \end{cases}$$

Неразделимый случай

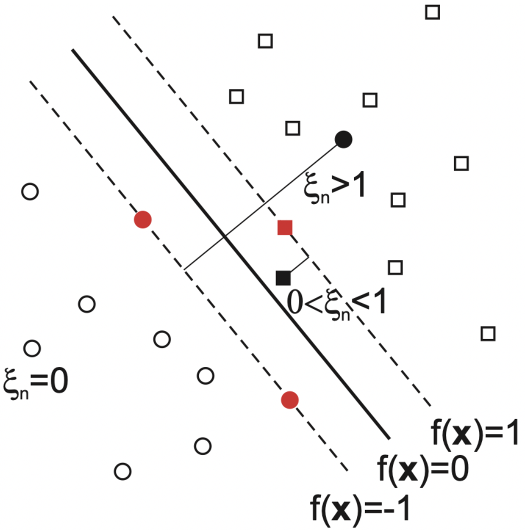
- Рассмотрим теперь случай произвольных данных, когда условие $y_i\langle w, x_i\rangle + b \geq 1$ не может быть выполнено для всех объектов обучающей выборки
- Тогда добавим в эти условия т.н. **ослабляющие коэффициенты** $\varepsilon_i \geq 0$:

$$y_i\langle w, x_i\rangle + b \geq 1 - \varepsilon_i$$

Ослабляющие коэффициенты

- $\varepsilon_i = 0$ — ошибки нет, объект x_i лежит за линиями уровня $|f(x)| = 1$
- $0 < \varepsilon_i \leq 1$ — ошибки нет, объект x_i лежит внутри коридора $0 \leq y_f(x) < 1$
- $\varepsilon_i > 1$ — ошибка есть, величина ошибки пропорциональна расстоянию от объекта x_i до гиперплоскости

Ослабляющие коэффициенты



Soft margin SVM

- Добавим минимазацию ошибок в критерий оптимизации и получим критерий для **метода опорных векторов в неразделимом случае (soft margin support vector machine)**

$$\begin{cases} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{n}\varepsilon_i \to \min\limits_{w,b,\varepsilon_i} \\ y_i\langle w, x_i\rangle + b \geq 1 - \varepsilon_i \\ \varepsilon_i \geq 0 \end{cases}$$

- Здесь $C \geq 0$ — коэффицент регуляризации, определяющий компромисс между количеством ошибок и простотой модели (близость весов из w к нулю)
- C задается пользователем до начала обучения

Безусловная формулировка SVM

- Перейдем к безусловной оптимизационной задаче
- Перепишем условия

$$\begin{cases} \varepsilon_i \geq 1 - y_i(\langle w, x_i \rangle + b) \\ \varepsilon_i \geq 0 \end{cases}$$

- В форму, в которой ошибки как можно меньше

$$\varepsilon_i = \max(0, 1 - y_i(\langle w, x_i \rangle + b)) = l_{hinge}(y_i, f(x_i))$$

- Получим безусловную задачу для метода опорных векторов:

$$\frac{1}{2}||w||^2 + C \sum_{i=1}^{n} \max(0, 1 - y_i(\langle w, x_i \rangle + b)) \to \min_{w, b, \varepsilon_i}$$

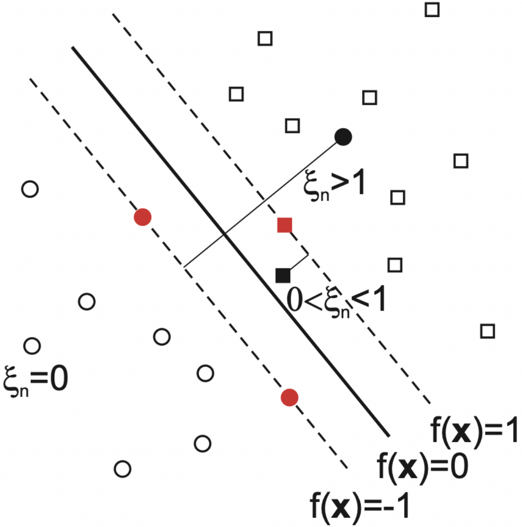
Двойственная задача для SVM

- Двойственная задача для SVM:

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\lambda^T diag(y) X^T X diag(y)\lambda + \lambda^T \vec{1} \to \max\limits_{\lambda} \\ y^T\lambda = 0 \\ 0 \le \lambda_i \le C \end{cases}$$

- Прямая задача оптимизации выпуклая, значит оптимальные значения функционалов прямой и двойственной задачи совпадают
- Более того, в данном случае решение прямой задачи (w^*, b^*) может быть выражено через решение двойственной задачи λ^*
- Получим классификатор $f(x) = (\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^* y_i x_i^T)x + b^*$
- Где для "красных" объектов можно найти $b^* = y_i(1 - (w^*)^T x_i)$ (усреднив по этому правилу)

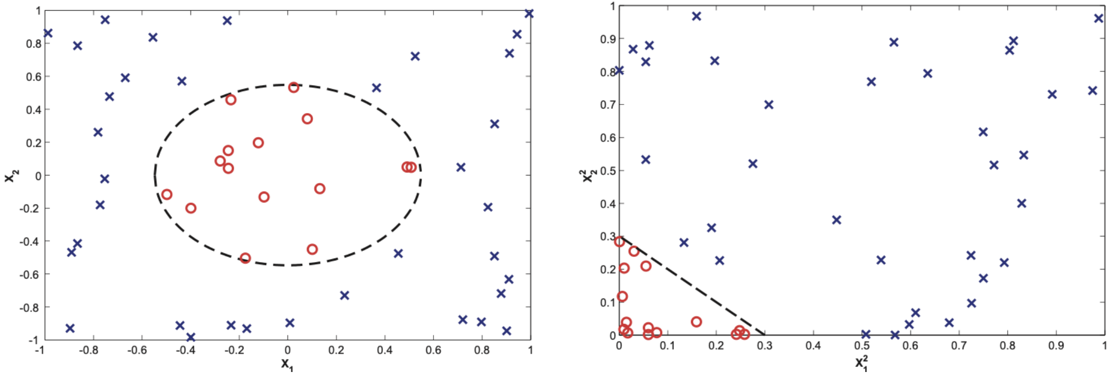
Опорные вектора



Ядровый переход

- На практике проверхность, разделяющая два класса, может быть существенно нелинейной
- Метод опорных векторов можно обобщить на случай построения нелинейных разделяющих поверхностей с помощью т.н. **ядрового перехода**

Ядровый переход к (x_1^2, x_2^2)



Ядровая функция

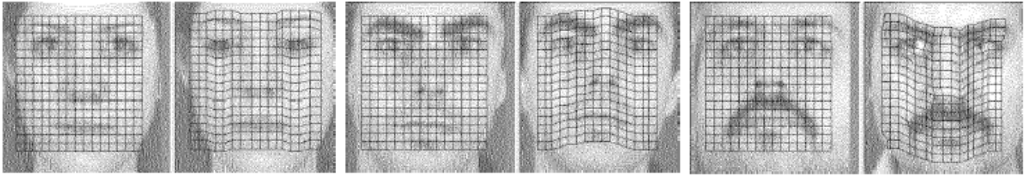
- Рассмотрим преобразование $\Phi : \mathbb{R} \to H$ из исходного пространства в новое
- Будем искать оптимальную разделяющую гиперплоскость в новом пространстве H с помощью метода опорных векторов
- Двойственная задача и решаюшая функция зависят только от скалярных произведений между объектами, поэтому достаточно знать лишь **ядровую функцию** для скалярных произведений:

$$\langle \Phi(x_1), \Phi(x_2) \rangle = K(x_1, x_2)$$

- Критерии для существования Φ:
  - Симметричность: $K(x_1, x_2) = K(x_2, x_1)$
  - Условие Мерсера
- Примеры ядровых функций:
  - Линейная: $K(x_1, x_2) = x_1^T x_2 + \theta, \theta \geq 0$
  - Степенная: $K(x_1, x_2) = (x_1^T x_2 + \theta)^d, \theta \geq 0, d \in \mathbb{N}$
  - Радиальная: $K(x_1, x_2) = e^{-\frac{||x_1 - x_2||^2}{2\sigma^2}}, \sigma > 0$

Применение

- Использование ядровых функций также бывает оправдано в тех случаях, когда пространство объектов обладает сложной структурой (например, изображения)
- И задание скалярных произведений между парами объектов в таком пространстве оказывается легче, чем выбор пространства признаков
- Такой подход получил название беспризнакового распознавания образов



Дополнительные источники

- http://www.machinelearning.ru/wiki/images/2/25/SMAIS11_SVM.pdf
- machinelearning.ru
- scikit-learn.org
- kaggle