Введение в искусственный интеллект. Машинное обучение

Лекция 6. Машины опорных векторов – SVM

Бабин Д.Н., Иванов И.Е., Петюшко А.А.

кафедра Математической Теории Интеллектуальных Систем

10 ноября 2020 г.







• Случай линейной разделимости



- Случай линейной разделимости
- Случай линейной неразделимости



- Случай линейной разделимости
- 2 Случай линейной неразделимости
- Решение с помощью двойственной задачи



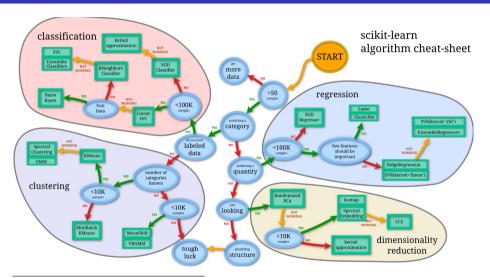
- Случай линейной разделимости
- 2 Случай линейной неразделимости
- Решение с помощью двойственной задачи
- Обобщение SVM с помощью ядрового трюка



- Случай линейной разделимости
- 2 Случай линейной неразделимости
- Решение с помощью двойственной задачи
- Обобщение SVM с помощью ядрового трюка
- Многоклассовый SVM

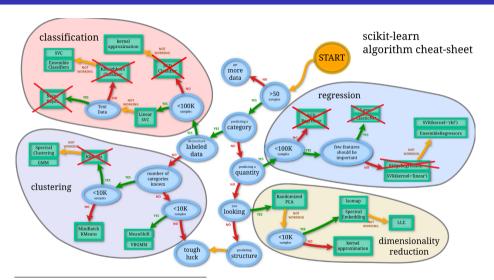


Дорожная карта Scikit-Learn¹





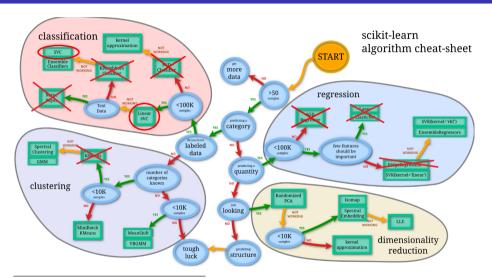
Дорожная карта Scikit-Learn¹



¹https://scikit-learn.org/stable/tutorial/machine_learning_map/



Дорожная карта Scikit-Learn¹



¹https://scikit-learn.org/stable/tutorial/machine_learning_map/



Вспомним прошлую лекцию

Рассмотрим задачу бинарной классификации: $X \to Y$, $X = \mathbb{R}^n$, $Y = \{+1, -1\}$ на обучающей выборке $X^m = (x_i, y_i)_{i=1}^m$. Линейный классификатор $a(x; w, w_0) = \text{sign}(\langle w, x \rangle - w_0)$.





Вспомним прошлую лекцию

Рассмотрим задачу бинарной классификации: $X \to Y$, $X = \mathbb{R}^n$, $Y = \{+1, -1\}$ на обучающей выборке $X^m = (x_i, y_i)_{i=1}^m$.

Линейный классификатор $a(x; w, w_0) = \text{sign}(\langle w, x \rangle - w_0)$.

Минимизация эмпирического риска в данном случае:

$$R(w, w_0, X^m) = \sum_{i=1}^m [a(x_i; w, w_0) \neq y_i] = \sum_{i=1}^m [M_i(w, w_0) < 0],$$

где отступ объекта x_i : $M_i = (\langle w, x_i \rangle - w_0)y_i$.



Вспомним прошлую лекцию

Рассмотрим задачу бинарной классификации: $X \to Y$, $X = \mathbb{R}^n$, $Y = \{+1, -1\}$ на обучающей выборке $X^m = (x_i, y_i)_{i=1}^m$.

Линейный классификатор $a(x; w, w_0) = \text{sign}(\langle w, x \rangle - w_0)$.

Минимизация эмпирического риска в данном случае:

$$R(w, w_0, X^m) = \sum_{i=1}^m [a(x_i; w, w_0) \neq y_i] = \sum_{i=1}^m [M_i(w, w_0) < 0],$$

где отступ объекта x_i : $M_i = (\langle w, x_i \rangle - w_0)y_i$. Добавим аппроксимацию и L_2 регуляризацию:

$$R(w, w_0, X^m) \le \sum_{i=1}^m \max(0, 1 - M_i(w, w_0)) + \frac{1}{2C} ||w||^2$$





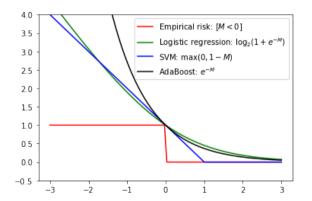
Аппроксимация и регуляризация

• Аппроксимация штрафует за приближение к границе классов: $M_i=1$



Аппроксимация и регуляризация

- Аппроксимация штрафует за приближение к границе классов: $M_i = 1$
- Регуляризация штрафует неустойчивые решения



Линейная разделимость

 $\exists w, w_0$ т.ч. $M_i(w, w_0) > 0$ для всех $i = 1, \dots m$.

Очевидно, что можно перенормировать вектор w, т.ч. $\min_i M_i(w, w_0) = 1$.

Разделяющая полоса: $-1 < \langle w, x_i \rangle - w_0 < +1$.

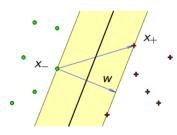
Разделяющая гиперплоскость (посередине):

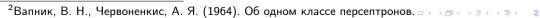
$$\langle w, x_i \rangle - w_0 = 0.$$

Можем добиться того, что существует по крайней мере одна точка на каждой из границ

(Упражнение: доказать):
$$\exists x_{\pm} : \langle w, x_{\pm} \rangle - w_0 = \pm 1.$$

Ширина полосы:
$$\frac{\langle x_+ - x_-, w \rangle}{||w||} = \frac{2}{||w||} o \mathsf{max}_w$$







Случай линейной разделимости – вывод

Т.о., в случае линейной разделимости можно оптимизационную задачу записать как:

$$egin{cases} rac{1}{2}||w||^2
ightarrow \min_w, \ y_i(\langle w, x_i
angle - w_0) \geq 1, \quad i=1,\ldots,m \end{cases}$$





Обобщим 3 задачу на этот случай: алгоритм может допускать ошибки на обучающих объектах.



³Cortes, C., and Vapnik, V. (1995). Support-vector networks.

Обобщим 3 задачу на этот случай: алгоритм может допускать ошибки на обучающих объектах.

Ограничение: таких ошибок должно быть поменьше.



³Cortes, C., and Vapnik, V. (1995). Support-vector networks.

Обобщим 3 задачу на этот случай: алгоритм может допускать ошибки на обучающих объектах.

Ограничение: таких ошибок должно быть поменьше.

Решение: введение дополнительных переменных $\xi_i \geq 0$, характеризующих величину ошибки (уменьшение отступа) на объектах x_i .



³Cortes, C., and Vapnik, V. (1995). Support-vector networks.

Обобщим³ задачу на этот случай: алгоритм может допускать ошибки на обучающих объектах.

Ограничение: таких ошибок должно быть поменьше.

Решение: введение дополнительных переменных $\xi_i > 0$, характеризующих величину ошибки (уменьшение отступа) на объектах x_i .

$$\begin{cases} \frac{1}{2} ||w||^2 + C \sum_{i=1}^m \xi_i \to \min_{w,w_0,\xi}, \\ y_i(\langle w, x_i \rangle - w_0) \ge 1 - \xi_i, & i = 1, \dots, m, \\ \xi_i \ge 0 & i = 1, \dots, m. \end{cases}$$



³Cortes, C., and Vapnik, V. (1995). Support-vector networks.

Обобщим 3 задачу на этот случай: алгоритм может допускать ошибки на обучающих объектах.

Ограничение: таких ошибок должно быть поменьше.

Решение: введение дополнительных переменных $\xi_i \geq 0$, характеризующих величину ошибки (уменьшение отступа) на объектах x_i .

$$\begin{cases} \frac{1}{2} ||w||^2 + C \sum_{i=1}^m \xi_i \to \min_{w,w_0,\xi}, \\ y_i(\langle w, x_i \rangle - w_0) \ge 1 - \xi_i, & i = 1, \dots, m, \\ \xi_i \ge 0 & i = 1, \dots, m. \end{cases}$$

Замечание. Положительная константа C определяет компромисс между максимизацией ширины разделяющей полосы и минимизацией суммарной ошибки.



³Cortes, C., and Vapnik, V. (1995). Support-vector networks.

O константе C

Поставленная выше оптимизационная задача эквивалентна минимизации аппроксимированного э.р. с регуляризатором:

$$\sum_{i=1}^{m} \max(0, 1 - y_i(\langle w, x_i \rangle - w_0)) + \frac{1}{2C} ||w||^2 \to min_{w,w_0}$$

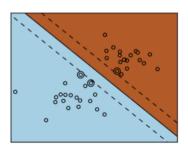


O константе C

Поставленная выше оптимизационная задача эквивалентна минимизации аппроксимированного э.р. с регуляризатором:

$$\sum_{i=1}^{m} \max(0, 1 - y_i(\langle w, x_i \rangle - w_0)) + \frac{1}{2C} ||w||^2 \to min_{w, w_0}$$

Большое значение C: узкая полоса, мало ошибок





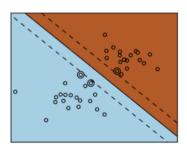


O константе C

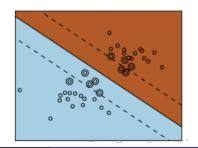
Поставленная выше оптимизационная задача эквивалентна минимизации аппроксимированного э.р. с регуляризатором:

$$\sum_{i=1}^m \max(0,1-y_i(\langle w,x_i\rangle-w_0)) + \frac{1}{2C}||w||^2 \rightarrow \textit{min}_{w,w_0}$$

Большое значение C: узкая полоса, мало ошибок



Маленькое значение C: широкая полоса, много ошибок





Условия Каруша-Куна-Таккера $(KKT)^{4,5}$

Условия ККТ – это **необходимые** условия решения задачи нелинейного программирования (обобщение метода множителей Лагранжа). Задача нелинейного программирования:

$$egin{cases} f(x)
ightarrow \min_{x}, \ g_{i}(x) \leq 0, & i=1,\ldots,k, \ h_{j}(x) = 0, & j=1,\ldots,\ell. \end{cases}$$

⁴W. Karush (1939). Minima of Functions of Several Variables with Inequalities as Side Constraints.

⁵Kuhn, H. W.; Tucker, A. W. (1951). Nonlinear programming.

Условия Каруша-Куна-Таккера $(KKT)^{4,5}$

Условия ККТ – это **необходимые** условия решения задачи нелинейного программирования (обобщение метода множителей Лагранжа). Задача нелинейного программирования:

$$\begin{cases} f(x) \to \min_{x}, \\ g_{i}(x) \leq 0, & i = 1, \dots, k, \\ h_{j}(x) = 0, & j = 1, \dots, \ell. \end{cases}$$

Необходимые условия: если x - точка локального минимума, то \exists множители μ_i, λ_j , т.ч.

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial x} = 0; L(x,\mu,\lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^k \mu_i g_i(x) + \sum_{j=1}^\ell \lambda_j h_j(x) & \text{ (функция Лагранжа)} \\ g_i(x) \leq 0, h_j(x) = 0 & \text{ (исходные ограничения)} \\ \mu_i \geq 0 & \text{ (двойственные ограничения)} \\ \mu_i g_i(x) = 0 & \text{ (дополняющая нежесткость)} \end{cases}$$

⁵Kuhn, H. W.; Tucker, A. W. (1951). Nonlinear programming.

⁴W. Karush (1939). Minima of Functions of Several Variables with Inequalities as Side Constraints.

^{\$}

Условия ККТ и SVM

Функция Лагранжа для SVM

$$L(w, w_0, \xi; \lambda, \eta) = \frac{1}{2} ||w||^2 - \sum_{i=1}^m \lambda_i (M_i(w, w_0) - 1) - \sum_{i=1}^m \xi_i (\lambda_i + \eta_i - C)$$
, где: λ_i – переменные, двойственные к ограничениям $M_i(w, w_0) \ge 1 - \xi_i$, η_i – переменные, двойственные к ограничениям $\xi_i > 0$.





Условия ККТ и SVM

Функция Лагранжа для SVM

$$L(w,w_0,\xi;\lambda,\eta)=rac{1}{2}||w||^2-\sum_{i=1}^m\lambda_i(M_i(w,w_0)-1)-\sum_{i=1}^m\xi_i(\lambda_i+\eta_i-C)$$
, где: λ_i – переменные, двойственные к ограничениям $M_i(w,w_0)\geq 1-\xi_i$, η_i – переменные, двойственные к ограничениям $\xi_i\geq 0$.

Необходимые условия примут вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial w} = 0; \, \frac{\partial L}{\partial w_0} = 0; \, \frac{\partial L}{\partial \xi} = 0 \\ \xi_i \geq 0, \lambda_i \geq 0, \, \eta_i \geq 0 & i = 1, \dots, m \\ \lambda_i = 0 \text{ либо } M_i(w, w_0) = 1 - \xi_i & i = 1, \dots, m \\ \eta_i = 0 \text{ либо } \xi_i = 0 & i = 1, \dots, m \end{cases}$$





$$L(w, w_0, \xi; \lambda, \eta) = \frac{1}{2} ||w||^2 - \sum_{i=1}^m \lambda_i (M_i(w, w_0) - 1) - \sum_{i=1}^m \xi_i (\lambda_i + \eta_i - C).$$

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial w} = w - \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i x_i = 0 & \Rightarrow w = \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i x_i \\ \frac{\partial L}{\partial w_0} = - \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i = 0 & \Rightarrow \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \xi_i} = -\lambda_i - \eta_i + C = 0 & \Rightarrow \lambda_i + \eta_i = C \end{cases}$$





$$L(w, w_0, \xi; \lambda, \eta) = \frac{1}{2} ||w||^2 - \sum_{i=1}^m \lambda_i (M_i(w, w_0) - 1) - \sum_{i=1}^m \xi_i (\lambda_i + \eta_i - C).$$

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial w} = w - \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i x_i = 0 & \Rightarrow w = \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i x_i \\ \frac{\partial L}{\partial w_0} = - \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i = 0 & \Rightarrow \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \xi_i} = -\lambda_i - \eta_i + C = 0 & \Rightarrow \lambda_i + \eta_i = C \end{cases}$$

 $oldsymbol{0}$ $\lambda_i = 0, \eta_i = C, \xi_i = 0, M_i \geq 1$: периферийные объекты





$$L(w, w_0, \xi; \lambda, \eta) = \frac{1}{2} ||w||^2 - \sum_{i=1}^m \lambda_i (M_i(w, w_0) - 1) - \sum_{i=1}^m \xi_i (\lambda_i + \eta_i - C).$$

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial w} = w - \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i x_i = 0 & \Rightarrow w = \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i x_i \\ \frac{\partial L}{\partial w_0} = - \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i = 0 & \Rightarrow \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \xi_i} = -\lambda_i - \eta_i + C = 0 & \Rightarrow \lambda_i + \eta_i = C \end{cases}$$

- $oldsymbol{0}$ $\lambda_i = 0, \eta_i = C, \xi_i = 0, M_i \geq 1$: периферийные объекты
- ② $0 < \lambda_i < C, 0 < \eta_i < C, \xi_i = 0, M_i = 1$: опорные объекты на границе





$$L(w, w_0, \xi; \lambda, \eta) = \frac{1}{2} ||w||^2 - \sum_{i=1}^m \lambda_i (M_i(w, w_0) - 1) - \sum_{i=1}^m \xi_i (\lambda_i + \eta_i - C).$$

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial w} = w - \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i x_i = 0 & \Rightarrow w = \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i x_i \\ \frac{\partial L}{\partial w_0} = - \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i = 0 & \Rightarrow \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial \xi_i} = -\lambda_i - \eta_i + C = 0 & \Rightarrow \lambda_i + \eta_i = C \end{cases}$$

- $oldsymbol{0}$ $\lambda_i = 0, \eta_i = C, \xi_i = 0, M_i \geq 1$: периферийные объекты
- $oldsymbol{0} < \lambda_i < C, 0 < \eta_i < C, \xi_i = 0, M_i = 1$: опорные объекты на границе
- $\delta \lambda_i = C, \eta_i = 0, \xi_i > 0, M_i < 1$: опорные объекты-ошибки





Прямая задача:

$$egin{cases} f(x)
ightarrow \min_x, \ g_i(x) \leq 0, & i = 1, \ldots, k, \ h_j(x) = 0, & j = 1, \ldots, \ell. \end{cases}$$

Функция Лагранжа: $L(x,\mu,\lambda)=f(x)+\sum_{i=1}^k \mu_i g_i(x)+\sum_{j=1}^\ell \lambda_j h_j(x) o \min_x.$





Прямая задача:

$$egin{cases} f(x)
ightarrow \min_x, \ g_i(x) \leq 0, & i = 1, \ldots, k, \ h_j(x) = 0, & j = 1, \ldots, \ell. \end{cases}$$

Функция Лагранжа: $L(x,\mu,\lambda)=f(x)+\sum_{i=1}^k \mu_i g_i(x)+\sum_{j=1}^\ell \lambda_j h_j(x)\to \min_x.$ Двойственная функция: $Q(\mu,\lambda)=\min_x L(x,\mu,\lambda).$





Прямая задача:

$$egin{cases} f(x)
ightarrow \min_x, \ g_i(x) \leq 0, & i = 1, \ldots, k, \ h_j(x) = 0, & j = 1, \ldots, \ell. \end{cases}$$

Функция Лагранжа: $L(x,\mu,\lambda)=f(x)+\sum_{i=1}^k\mu_ig_i(x)+\sum_{j=1}^\ell\lambda_jh_j(x) o \min_x.$

Двойственная функция: $Q(\mu,\lambda) = \min_{x} L(x,\mu,\lambda)$.

Двойственная задача:

$$egin{cases} Q(\mu,\lambda)
ightarrow \mathsf{max}_{\mu,\lambda}, \ \mu_i \geq 0, & i = 1,\dots,k \end{cases}$$





Прямая задача:

$$egin{cases} f(x)
ightarrow \min_x, \ g_i(x) \leq 0, & i = 1, \ldots, k, \ h_j(x) = 0, & j = 1, \ldots, \ell. \end{cases}$$

Функция Лагранжа: $L(x,\mu,\lambda)=f(x)+\sum_{i=1}^k \mu_i g_i(x)+\sum_{j=1}^\ell \lambda_j h_j(x) o \min_x.$

Двойственная функция: $Q(\mu,\lambda) = \min_{x} L(x,\mu,\lambda)$.

Двойственная задача:

$$egin{cases} Q(\mu,\lambda)
ightarrow \mathsf{max}_{\mu,\lambda}, \ \mu_i \geq 0, & i = 1,\dots,k \end{cases}$$

Теорема (Дуальность Вулфа⁶)

Если $f(x), g_i(x), h_j(x)$ – выпуклые функции, x^* – решение прямой задачи, а (μ^*, λ^*) – решение двойственной задачи, то $Q(\mu^*, \lambda^*) = f(x^*)$.

⁶Wolfe, P. (1961). A duality theorem for non-linear programming.

Подставим решения прямой задачи

$$w = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i x_i, \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i = 0, \lambda_i + \eta_i = C$$

в функцию Лагранжа

$$L(w, w_0, \xi; \lambda, \eta) = \frac{1}{2} ||w||^2 - \sum_{i=1}^m \lambda_i (y_i (\langle w, x_i \rangle - w_0) - 1) - \sum_{i=1}^m \xi_i (\lambda_i + \eta_i - C).$$



Подставим решения прямой задачи

$$w = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i x_i, \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i = 0, \lambda_i + \eta_i = C$$

в функцию Лагранжа

$$L(w, w_0, \xi; \lambda, \eta) = \frac{1}{2} ||w||^2 - \sum_{i=1}^m \lambda_i (y_i (\langle w, x_i \rangle - w_0) - 1) - \sum_{i=1}^m \xi_i (\lambda_i + \eta_i - C).$$
 Получим:

$$Q(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i x_i \sum_{j=1}^{m} \lambda_j y_j x_j - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i \left\langle \sum_{j=1}^{m} \lambda_j y_j x_j, x_i \right\rangle + w_0 \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i - \sum_{i=1}^{m} \xi_i (C - C) = 0$$

$$=-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{i=1}^{m}\lambda_{i}\lambda_{j}y_{i}y_{j}\langle x_{i},x_{j}\rangle+\sum_{i=1}^{m}\lambda_{i}$$





Объединяя, получаем формулировку двойственной задачи:

$$\begin{cases} -Q(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \to \min_{\lambda}, \\ 0 \leq \lambda_i \leq C, \\ \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i = 0. \end{cases}$$



⁷https://en.wikipedia.org/wiki/Quadratic_programming

Объединяя, получаем формулировку двойственной задачи:

$$\begin{cases} -Q(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \to \min_{\lambda}, \\ 0 \le \lambda_i \le C, \\ \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i = 0. \end{cases}$$

Минимизируется квадратичный функционал $Q(\lambda)$, имеющий неотрицательно определённую квадратичную форму \Rightarrow этот функционал – выпуклый.



⁷https://en.wikipedia.org/wiki/Quadratic_programming

Объединяя, получаем формулировку двойственной задачи:

$$\begin{cases} -Q(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \to \min_{\lambda}, \\ 0 \le \lambda_i \le C, \\ \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i = 0. \end{cases}$$

Минимизируется квадратичный функционал $Q(\lambda)$, имеющий неотрицательно определённую квадратичную форму \Rightarrow этот функционал – выпуклый. Область, определяемая линейными ограничениями, также выпуклая.



⁷https://en.wikipedia.org/wiki/Quadratic_programming

Объединяя, получаем формулировку двойственной задачи:

$$\begin{cases} -Q(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \lambda_{i} \lambda_{j} y_{i} y_{j} \langle x_{i}, x_{j} \rangle - \sum_{i=1}^{m} \lambda_{i} \to \min_{\lambda}, \\ 0 \leq \lambda_{i} \leq C, \\ \sum_{i=1}^{m} \lambda_{i} y_{i} = 0. \end{cases}$$

Минимизируется квадратичный функционал $Q(\lambda)$, имеющий неотрицательно определённую квадратичную форму \Rightarrow этот функционал – выпуклый. Область, определяемая линейными ограничениями, также выпуклая. Следовательно, данная двойственная задача имеет **единственное** решение.



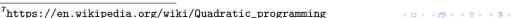
Объединяя, получаем формулировку двойственной задачи:

$$\begin{cases} -Q(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \to \min_{\lambda}, \\ 0 \le \lambda_i \le C, \\ \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i = 0. \end{cases}$$

Минимизируется квадратичный функционал $Q(\lambda)$, имеющий неотрицательно определённую квадратичную форму \Rightarrow этот функционал – выпуклый. Область, определяемая линейными ограничениями, также выпуклая.

Следовательно, данная двойственная задача имеет единственное решение.

Способ решения – методами **квадратичного** программирования (например, можно использовать метод внутренней точки⁷).





Решение прямой задачи для SVM

Пусть единственное решение двойственной задачи $(\lambda_i)_{i=1}^m$. Тогда решение прямой задачи выражается через решение двойственной как:

$$egin{cases} w = \sum_{\lambda_i
eq 0} \lambda_i y_i x_i, & \text{суммируем только по опорным векторам } \lambda_i
eq 0 \ w_0 = \langle w, x_j
angle - y_j & \text{для опорного вектора на границе } 0 < \lambda_j < C \end{cases}$$

Решение прямой задачи для SVM

Пусть единственное решение двойственной задачи $(\lambda_i)_{i=1}^m$. Тогда решение прямой задачи выражается через решение двойственной как:

$$egin{cases} w = \sum_{\lambda_i
eq 0} \lambda_i y_i x_i, & \text{суммируем только по опорным векторам } \lambda_i
eq 0 \ w_0 = \langle w, x_j
angle - y_j & \text{для опорного вектора на границе } 0 < \lambda_j < C \end{cases}$$

При этом сам линейный классификатор примет вид

$$a(x) = \operatorname{sign}(\sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i \langle x_i, x \rangle - w_0)$$

что можно понимать как линейность в пространстве \mathbb{R}^m с признаками $f_i = \langle x_i, x \rangle$.





SVM и регуляризаторы⁸

Напомним задачу минимизации аппроксимированного э.р. (в данном случае – Hinge loss) с L_2 -регуляризатором:

$$\sum_{i=1}^{m} \max(0, 1 - y_i(\langle w, x_i \rangle - w_0)) + \frac{1}{2C} ||w||^2 \to min_{w,w_0}$$

⁸Lopez-Martinez, D. (2017). Regularization approaches for support vector machines with applications to who biomedical data.

SVM и регуляризаторы 8

Напомним задачу минимизации аппроксимированного э.р. (в данном случае - Hinge loss) с L_2 -регуляризатором:

$$\sum_{i=1}^{m} \max(0, 1 - y_i(\langle w, x_i \rangle - w_0)) + \frac{1}{2C} ||w||^2 \to min_{w, w_0}$$

А что если добавить и/или заменить на L_1 -регуляризацию?

17 / 28

⁸Lopez-Martinez, D. (2017). Regularization approaches for support vector machines with applications to [2018]. biomedical data.

SVM и регуляризаторы⁸

Напомним задачу минимизации аппроксимированного э.р. (в данном случае - Hinge loss) с L_2 -регуляризатором:

$$\sum_{i=1}^{m} \max(0, 1 - y_i(\langle w, x_i \rangle - w_0)) + \frac{1}{2C} ||w||^2 \to min_{w,w_0}$$

А что если добавить и/или заменить на L_1 -регуляризацию? Оказывается, обычная SVM (которая соответствует гребневой регрессии) преобразуется в LASSO либо ElasticNet SVM, и при этом все равно возможно сведение к квадратичной задаче.

17 / 28

⁸Lopez-Martinez, D. (2017). Regularization approaches for support vector machines with applications to 🔁 🦇 biomedical data.

LASSO SVM

Аппроксимированный э.р. с L_1 регуляризатором:

$$\sum_{i=1}^m \mathsf{max}(0, 1 - y_i(\langle w, x_i
angle - w_0)) + rac{1}{C} \sum_{i=1}^n |w_i|
ightarrow \mathit{min}_{w,w_0}$$



LASSO SVM

Аппроксимированный э.р. с L_1 регуляризатором:

$$\sum_{i=1}^m \mathsf{max}(0, 1 - y_i(\langle w, x_i \rangle - w_0)) + \frac{1}{C} \sum_{i=1}^n |w_i| \to \mathit{min}_{w,w_0}$$

Введем переменные $u_i = \frac{|w_i| + w_i}{2}, v_i = \frac{|w_i| - w_i}{2}, u_i \ge 0, v_i \ge 0.$





LASSO SVM

Аппроксимированный э.р. с L_1 регуляризатором:

$$\sum_{i=1}^m \mathsf{max}(0, 1 - y_i(\langle w, x_i
angle - w_0)) + rac{1}{C} \sum_{i=1}^n |w_i|
ightarrow \mathit{min}_{w,w_0}$$

Введем переменные $u_i = \frac{|w_i| + w_i}{2}, v_i = \frac{|w_i| - w_i}{2}, u_i \ge 0, v_i \ge 0.$ Тогда замена переменных: $w_i = u_i - v_i, |w_i| = u_i + v_i$, и задача выше сводится к:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n} u_i + \sum_{i=1}^{n} v_i + C \sum_{i=1}^{m} \xi_i \to \min_{u,v,w_0,\xi}, \\ y_i(\langle u, x_i \rangle - \langle v, x_i \rangle - w_0) \ge 1 - \xi_i, & i = 1, \dots, m, \\ \xi_i \ge 0 & i = 1, \dots, m, \\ u_i \ge 0, v_i \ge 0 & i = 1, \dots, n. \end{cases}$$

которая аналогична рассмотренной до этого.



Ядро и неотрицательность

Если в исходном пространстве сложно разделить выборку, то попробуем перейти в пространство большей размерности $^9 \ \varphi : X \to H.$



⁹Boser, B. E., Guyon, I. M., and Vapnik, V. N. (1992). A training algorithm for optimal margin classifiers.

Ядро и неотрицательность

Если в исходном пространстве сложно разделить выборку, то попробуем перейти в пространство большей размерности $^9 \ \varphi : X o H.$

Определение ядра

Ядро – функция $K: X \times X \to \mathbb{R}$, т.ч. $K(x_1, x_2) = \langle \varphi(x_1), \varphi(x_2) \rangle$ при некотором $\varphi: X \to H$, где H – гильбертово пространство.



⁹Boser, B. E., Guyon, I. M., and Vapnik, V. N. (1992). A training algorithm for optimal margin classifiers. ○ ९ ○

Ядро и неотрицательность

Если в исходном пространстве сложно разделить выборку, то попробуем перейти в пространство большей размерности $^9 \ \varphi : X \to H$.

Определение ядра

Ядро – функция $K: X \times X \to \mathbb{R}$, т.ч. $K(x_1, x_2) = \langle \varphi(x_1), \varphi(x_2) \rangle$ при некотором $\varphi: X \to H$, где H – гильбертово пространство.

Неотрицательная определенность

Следующие два определения эквивалентны для проверки $K(x_1,x_2)$

- ullet $\int_X \int_X K(x_1,x_2) f(x_1) f(x_2) dx_1 dx_2 \geq 0$ для любой функции $f:X o \mathbb{R}$
- Для любой конечной выборки $X^m = (x_1, \dots, x_m)$ из X матрица $K = \|K(x_i, x_j)\|$ размера $m \times m$ неотрицательно определена: $z^T K z \ge 0$ для любого $z \in \mathbb{R}^m$.



⁹Boser, B. E., Guyon, I. M., and Vapnik, V. N. (1992). A training algorithm for optimal margin classifiers. ○ △ ○

Проверка на ядро

Теорема Мерсера¹⁰

Функция $K(x_1, x_2)$ является ядром тогда и только тогда, когда:

- \bullet $K(x_1, x_2)$ симметрична: $K(x_1, x_2) = K(x_2, x_1)$, и
- $K(x_1, x_2)$ неотрицательно определена.

¹⁰Mercer, J. (1909). Functions of positive and negative type, and their connection the theory of integral 💆 🦇 equations.

Проверка на ядро

Теорема Мерсера¹⁰

Функция $K(x_1, x_2)$ является ядром тогда и только тогда, когда:

- $K(x_1, x_2)$ симметрична: $K(x_1, x_2) = K(x_2, x_1)$, и
- $K(x_1, x_2)$ неотрицательно определена.

Замечание. Если K не удовлетворяет указанным выше условиям, то минимизируемый функционал для классификатора уже не будет выпуклым, и решение может оказаться не единственным!

¹⁰Mercer. J. (1909). Functions of positive and negative type, and their connection the theory of integral 🗾 씷 equations.

ullet Скалярное произведение $K(x_1,x_2) = \langle x_1,x_2
angle$ – ядро



- ullet Скалярное произведение $K(x_1,x_2)=\langle x_1,x_2
 angle$ ядро
- Константа $K(x_1, x_2) = c$ ядро





- ullet Скалярное произведение $K(x_1,x_2) = \langle x_1,x_2
 angle$ ядро
- Константа $K(x_1, x_2) = c ядро$
- ullet Произведение ядер $K(x_1,x_2)=K_1(x_1,x_2)K_2(x_1,x_2)$ ядро





- ullet Скалярное произведение $K(x_1,x_2) = \langle x_1,x_2
 angle$ ядро
- Константа $K(x_1, x_2) = c ядро$
- ullet Произведение ядер $K(x_1,x_2)=K_1(x_1,x_2)K_2(x_1,x_2)$ ядро
- ullet Для любой $arphi:X o\mathbb{R}$ сепарабельная $K(x_1,x_2)=arphi(x_1)arphi(x_2)$ ядро





- Скалярное произведение $K(x_1, x_2) = \langle x_1, x_2 \rangle$ ядро
- Константа $K(x_1, x_2) = c ядро$
- Произведение ядер $K(x_1,x_2)=K_1(x_1,x_2)K_2(x_1,x_2)$ ядро
- ullet Для любой $arphi:X o\mathbb{R}$ сепарабельная $K(x_1,x_2)=arphi(x_1)arphi(x_2)$ ядро
- ullet Линейная $K(x_1,x_2)=lpha_1K_1(x_1,x_2)+lpha_2K_2(x_1,x_2)$ ядро при $lpha_1,lpha_2>0$, K_1,K_2 ядрах





- ullet Скалярное произведение $K(x_1,x_2) = \langle x_1,x_2
 angle$ ядро
- Константа $K(x_1, x_2) = c ядро$
- ullet Произведение ядер $K(x_1,x_2)=K_1(x_1,x_2)K_2(x_1,x_2)$ ядро
- ullet Для любой $arphi:X o\mathbb{R}$ сепарабельная $K(x_1,x_2)=arphi(x_1)arphi(x_2)$ ядро
- ullet Линейная $K(x_1,x_2)=lpha_1K_1(x_1,x_2)+lpha_2K_2(x_1,x_2)$ ядро при $lpha_1,lpha_2>0$, K_1,K_2 ядрах
- ullet Для любой arphi:X o X подстановка $K(x_1,x_2)=K_1(arphi(x_1),arphi(x_2))$ ядро при K_1 ядро





- ullet Скалярное произведение $K(x_1,x_2) = \langle x_1,x_2
 angle$ ядро
- Константа $K(x_1, x_2) = c ядро$
- ullet Произведение ядер $K(x_1,x_2)=K_1(x_1,x_2)K_2(x_1,x_2)$ ядро
- ullet Для любой $arphi:X o\mathbb{R}$ сепарабельная $K(x_1,x_2)=arphi(x_1)arphi(x_2)$ ядро
- ullet Линейная $K(x_1,x_2)=lpha_1K_1(x_1,x_2)+lpha_2K_2(x_1,x_2)$ ядро при $lpha_1,lpha_2>0$, K_1,K_2 ядрах
- ullet Для любой arphi:X o X подстановка $K(x_1,x_2)=K_1(arphi(x_1),arphi(x_2))$ ядро при K_1 ядро
- $K(x_1,x_2)=k(x_1-x_2)$ ядро \Leftrightarrow Фурье-образ $F[k](\omega)=(2\pi)^{\frac{n}{2}}\int_X e^{-i\langle\omega,x\rangle}k(x)dx$ неотрицателен





- Скалярное произведение $K(x_1, x_2) = \langle x_1, x_2 \rangle$ ядро
- Константа $K(x_1, x_2) = c ядро$
- ullet Произведение ядер $K(x_1,x_2)=K_1(x_1,x_2)K_2(x_1,x_2)$ ядро
- ullet Для любой $arphi:X o\mathbb{R}$ сепарабельная $K(x_1,x_2)=arphi(x_1)arphi(x_2)$ ядро
- ullet Линейная $K(x_1,x_2)=lpha_1K_1(x_1,x_2)+lpha_2K_2(x_1,x_2)$ ядро при $lpha_1,lpha_2>0$, K_1,K_2 ядрах
- ullet Для любой arphi:X o X подстановка $K(x_1,x_2)=K_1(arphi(x_1),arphi(x_2))$ ядро при K_1 ядро
- $K(x_1,x_2)=k(x_1-x_2)$ ядро \Leftrightarrow Фурье-образ $F[k](\omega)=(2\pi)^{\frac{n}{2}}\int_X \mathrm{e}^{-i\langle\omega,x\rangle}k(x)dx$ неотрицателен
- Композиция произвольного ядра K_1 и произвольной функции $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, представимой в виде сходящегося степенного ряда с неотрицательными коэффициентами $K(x_1,x_2)=f(K_1(x_1,x_2))$ ядро





SVM с другими ядрами

Изначально наша двойственная задача была сформулирована в терминах линейного ядра:

$$\begin{cases}
-Q(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \to \min_{\lambda}, \\
0 \le \lambda_i \le C, \\
\sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i = 0.
\end{cases}$$

SVM с другими ядрами

Изначально наша двойственная задача была сформулирована в терминах линейного ядра:

$$\begin{cases} -Q(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \to \min_{\lambda}, \\ 0 \leq \lambda_i \leq C, \\ \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i = 0. \end{cases}$$

Когда мы меняем ядро с $\langle x_i, x_j \rangle$ на $K(x_i, x_j)$, задача преобразуется в:

$$\begin{cases}
-Q(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \lambda_i \lambda_j y_i y_j K(x_i, x_j) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \to \min_{\lambda}, \\
0 \le \lambda_i \le C, \\
\sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i = 0.
\end{cases}$$



SVM с другими ядрами

Изначально наша двойственная задача была сформулирована в терминах линейного ядра:

$$\begin{cases} -Q(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \to \min_{\lambda}, \\ 0 \leq \lambda_i \leq C, \\ \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i = 0. \end{cases}$$

Когда мы меняем ядро с $\langle x_i, x_j \rangle$ на $K(x_i, x_j)$, задача преобразуется в:

$$\begin{cases} -Q(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \lambda_i \lambda_j y_i y_j K(x_i, x_j) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \to \min_{\lambda}, \\ 0 \le \lambda_i \le C, \\ \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i = 0. \end{cases}$$

При этом сам линейный классификатор принимает вид $(x_j$ - опорный вектор на границе):

$$a(x) = sign(\sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i K(x_i, x) - w_0), w_0 = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i y_i K(x_i, x_j) - y_j$$





Пусть
$$X = \mathbb{R}^2$$
, $K(u, v) = \langle u, v \rangle^2$ при $u = (u_1, u_2), v = (v_1, v_2)$. Хотим найти H и $\varphi : X \to H$, т.ч. $K(x_1, x_2) = \langle \varphi(x_1), \varphi(x_2) \rangle$.





Пусть
$$X = \mathbb{R}^2$$
, $K(u, v) = \langle u, v \rangle^2$ при $u = (u_1, u_2), v = (v_1, v_2)$. Хотим найти H и $\varphi : X \to H$, т.ч. $K(x_1, x_2) = \langle \varphi(x_1), \varphi(x_2) \rangle$.

Сделаем эквивалентные преобразования:

$$K(u,v) = \langle u,v \rangle^2 = \langle (u_1,u_2), (v_1,v_2) \rangle^2 = (u_1v_1 + u_2v_2)^2 = u_1^2v_1^2 + u_2^2v_2^2 + 2u_1v_1u_2v_2$$



Пусть
$$X = \mathbb{R}^2$$
, $K(u, v) = \langle u, v \rangle^2$ при $u = (u_1, u_2), v = (v_1, v_2)$.
Хотим найти H и $\varphi: X \to H$, т.ч. $K(x_1, x_2) = \langle \varphi(x_1), \varphi(x_2) \rangle$.
Сделаем эквивалентные преобразования:
 $K(u, v) = \langle u, v \rangle^2 = \langle (u_1, u_2), (v_1, v_2) \rangle^2 = (u_1 v_1 + u_2 v_2)^2 = u_1^2 v_1^2 + u_2^2 v_2^2 + 2u_1 v_1 u_2 v_2$
 $K(u, v) = \langle (u_1^2, u_2^2, \sqrt{2}u_1 u_2), (v_1^2, v_2^2, \sqrt{2}v_1 v_2) \rangle$





Пусть
$$X=\mathbb{R}^2$$
, $K(u,v)=\langle u,v\rangle^2$ при $u=(u_1,u_2),v=(v_1,v_2)$.
 Хотим найти H и $\varphi:X\to H$, т.ч. $K(x_1,x_2)=\langle \varphi(x_1),\varphi(x_2)\rangle$.
 Сделаем эквивалентные преобразования:
$$K(u,v)=\langle u,v\rangle^2=\langle (u_1,u_2),(v_1,v_2)\rangle^2=(u_1v_1+u_2v_2)^2=u_1^2v_1^2+u_2^2v_2^2+2u_1v_1u_2v_2$$

$$K(u,v)=\langle (u_1^2,u_2^2,\sqrt{2}u_1u_2),(v_1^2,v_2^2,\sqrt{2}v_1v_2)\rangle$$
 Т.о. $H=\mathbb{R}^3$ и $\varphi:(u_1,u_2)\mapsto (u_1^2,u_2^2,\sqrt{2}u_1u_2)$.



23 / 28



Пусть
$$X = \mathbb{R}^2$$
, $K(u, v) = \langle u, v \rangle^2$ при $u = (u_1, u_2), v = (v_1, v_2)$.

Хотим найти H и $\varphi: X \to H$, т.ч. $K(x_1, x_2) = \langle \varphi(x_1), \varphi(x_2) \rangle$.

Сделаем эквивалентные преобразования:

$$K(u,v) = \langle u,v \rangle^2 = \langle (u_1,u_2), (v_1,v_2) \rangle^2 = (u_1v_1 + u_2v_2)^2 = u_1^2v_1^2 + u_2^2v_2^2 + 2u_1v_1u_2v_2$$

$$K(u,v) = \langle (u_1^2, u_2^2, \sqrt{2}u_1u_2), (v_1^2, v_2^2, \sqrt{2}v_1v_2) \rangle$$

$$K(u,v) = \langle (u_1^2, u_2^2, \sqrt{2}u_1u_2), (v_1^2, v_2^2, \sqrt{2}v_1v_2) \rangle$$

$$K(u,v) = \langle (u_1^2, u_2^2, \sqrt{2}u_1u_2), (v_1^2, v_2^2, \sqrt{2}v_1v_2) \rangle$$

T.o., $H = \mathbb{R}^3$ in $\varphi : (u_1, u_2) \mapsto (u_1^2, u_2^2, \sqrt{2}u_1u_2)$.

Линейной поверхности в H будет соответствовать квадратичная поверхность в X.





• Полиномиальное ядро с мономами степени d: $K(x_1, x_2) = \langle x_1, x_2 \rangle^d$



- ullet Полиномиальное ядро с мономами степени $d\colon K(x_1,x_2) = \langle x_1,x_2 \rangle^d$
- ullet Полиномиальное ядро с мономами степени $\leq d \colon K(x_1,x_2) = (\langle x_1,x_2 \rangle + 1)^d$





- ullet Полиномиальное ядро с мономами степени $d\colon K(x_1,x_2) = \langle x_1,x_2 \rangle^d$
- ullet Полиномиальное ядро с мономами степени $\leq d$: $K(x_1,x_2)=(\langle x_1,x_2 \rangle+1)^d$
- ullet Радиальное ядро (RBF): $K(x_1,x_2) = \exp(-\gamma ||x_1-x_2||^2)$ (наиболее универсальное)

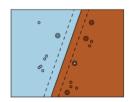




- Полиномиальное ядро с мономами степени d: $K(x_1, x_2) = \langle x_1, x_2 \rangle^d$
- ullet Полиномиальное ядро с мономами степени $\leq d$: $K(x_1,x_2)=(\langle x_1,x_2 \rangle+1)^d$
- \bullet Радиальное ядро (RBF): $K(x_1, x_2) = \exp(-\gamma ||x_1 x_2||^2)$ (наиболее универсальное)

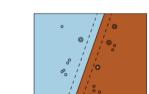
Линейное ядро

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

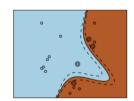


- Полиномиальное ядро с мономами степени $d: K(x_1, x_2) = \langle x_1, x_2 \rangle^d$
- Полиномиальное ядро с мономами степени $\leq d$: $K(x_1, x_2) = (\langle x_1, x_2 \rangle + 1)^d$
- Радиальное ядро (RBF): $K(x_1, x_2) = \exp(-\gamma ||x_1 x_2||^2)$ (наиболее универсальное)

Линейное ядро $K(x_1,x_2)=\langle x_1,x_2\rangle$



Полиномиальное ядро $K(x_1, x_2) = (\langle x_1, x_2 \rangle + 1)^3$

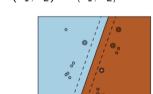




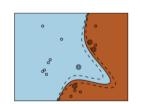


- Полиномиальное ядро с мономами степени $d: K(x_1, x_2) = \langle x_1, x_2 \rangle^d$
- Полиномиальное ядро с мономами степени $\leq d$: $K(x_1, x_2) = (\langle x_1, x_2 \rangle + 1)^d$
- Радиальное ядро (RBF): $K(x_1, x_2) = \exp(-\gamma ||x_1 x_2||^2)$ (наиболее универсальное)

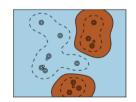
Линейное ядро
$$K(x_1,x_2)=\langle x_1,x_2
angle$$



Полиномиальное ядро $K(x_1, x_2) = (\langle x_1, x_2 \rangle + 1)^3$



Радиальное ядро $K(x_1, x_2) = \exp(-||x_1 - x_2||^2)$





24 / 28



Многоклассовый SVM

Предположим, что нужно построить классификатор методом опорных векторов для задачи классификации с количеством классов |Y| = N > 2. Тогда возможны 2 варианта:



Многоклассовый SVM

Предположим, что нужно построить классификатор методом опорных векторов для задачи классификации с количеством классов |Y| = N > 2. Тогда возможны 2 варианта:

Стратегия "один-против-всех"

Обучаем И бинарных

SVM-классификаторов, каждый из которых отделяет некоторый класс от остальных

N-1 классов.

Затем в качестве класса берем

$$a(x, w, w_0) = \operatorname{arg\,max}_{c \in Y}(\langle \dot{w}^c, x \rangle - w_0^c)$$



Многоклассовый SVM

Предположим, что нужно построить классификатор методом опорных векторов для задачи классификации с количеством классов |Y| = N > 2. Тогда возможны 2 варианта:

Стратегия "один-против-всех"

Обучаем И бинарных

SVM-классификаторов, каждый из которых отделяет некоторый класс от остальных N-1 классов.

Затем в качестве класса берем $a(x,w,w_0)=\arg\max_{c\in Y}(\langle w^c,x\rangle-w_0^c)$

Стратегия "каждый-против-каждого"

Обучаем $\frac{N(N-1)}{2}$ бинарных

SVM-классификаторов, каждый из которых отделяет между собой некоторую пару классов.

В результате применения классификаторов получаем $\frac{N(N-1)}{2}$ доминирующих классов. Итоговый класс выбирается большинством голосов.





Плюсы и минусы SVM

Плюсы

- Наглядная оптимизационная модель
- Задача имеет единственное решение
- Легко обобщается для нелинейной классификации

Плюсы и минусы SVM

Плюсы

- Наглядная оптимизационная модель
- Задача имеет единственное решение
- Легко обобщается для нелинейной классификации

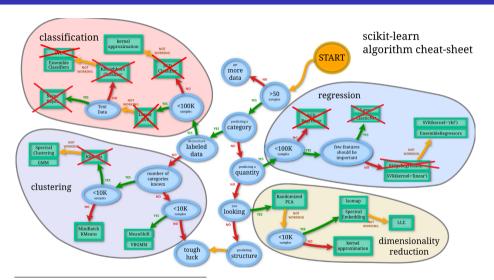
Минусы

- Непонятно, как подбирать ядро в конкретном случае
- Подбор константы С
- Решение задачи квадратичного программирования, особенно с экзотическими ядрами, может занять много времени





Дорожная карта Scikit-Learn¹¹





Источники

Ha основе материалов сайта http://www.machinelearning.ru.

