ZAAWANSOWANE METODY EKSPLORACJI

MASZYNA WEKTORÓW NOŚNYCH

Prof. dr hab. inż. Grzegorz Dudek
Wydział Matematyki i Informatyki
Uniwersytet Łódzki

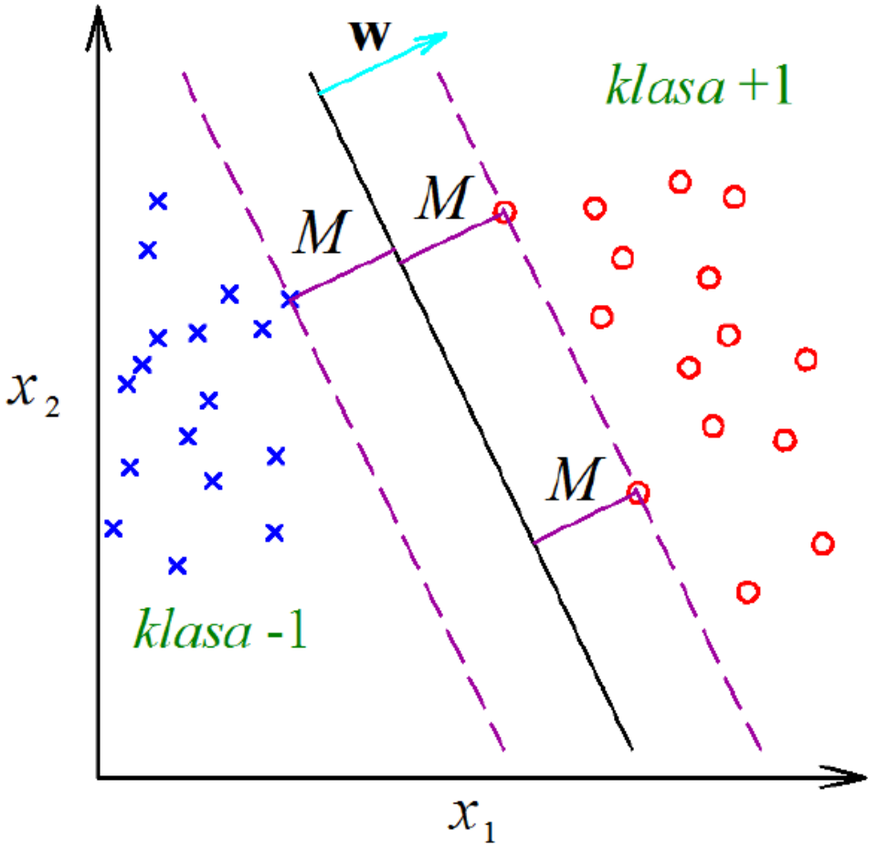
Definicja problemu

Support Vector Machine (SVM, maszyna wektorów nośnych)

Rozważmy problem klasyfikacji przykładów **x** do jednej z dwóch klas oznaczonych etykietami y = +1 lub y = –1.

Załóżmy, że chcemy znaleźć równanie (hiper)płaszczyzny dyskryminacyjnej (decyzyjnej) separującej punkty z klasy +1 od punktów z klasy –1, ale takiej:

- która leży w środku pasma separującego te klasy i
- pasmo to ma maksymalną szerokość *M*.



Definicja problemu

Musimy więc znaleźć taką płaszczyznę leżącą pomiędzy obszarami obu klas, dla której odległość mierzona pomiędzy tą płaszczyzną a najbliższymi do niej punktami z obu klas (tzw. wektorami nośnymi/wspierającymi/podpierającymi) jest największa.

Odległość punktu od płaszczyzny wyraża wzór:

$$d = \frac{| w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_n x_n + w_0 |}{\sqrt{w_1^2 + w_2^2 + \ldots + w_n^2}} = \frac{| \mathbf{w}^T \mathbf{x} + w_0 |}{\|\mathbf{w}\|}$$

Wektor współczynników $\mathbf{w} = [w_1, w_2, \ldots, w_n]^T$ nazywamy wektorem normalnym płaszczyzny (jest on prostopadły do płaszczyzny). $\|\mathbf{w}\|$ to długość tego wektora.

Wartość bezwzględna w liczniku zapobiega ujemnym wartościom odległości dla punktów leżących po jednej stronie prostej. Jeśli przyjmiemy, że zachodzi to dla punktów z klasy –1, to odległość możemy zapisać:

$$d = \frac{y(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + w_0)}{\|\mathbf{w}\|}$$

Definicja problemu

Żądamy, żeby odległość pomiędzy każdym punktem $\mathbf{x}_i$, a płaszczyzną dyskryminacyjną była nie mniejsza od pewnej wartości M zwanej marginesem:

$$\frac{y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + w_0)}{\|\mathbf{w}\|} \geq M, \quad \forall i \qquad (*)$$

Margines powinien być jak największy. Szukamy takich współczynników płaszczyzny dyskryminacyjnej, aby osiągnąć maksymalny margines. Takich rozwiązań jest nieskończenie wiele, ponieważ jest nieskończenie wiele wektorów normalnych do danej płaszczyzny (różnią się długością).

Narzućmy więc ograniczenie na długość wektora $\mathbf{w}$. Przyjmijmy, że ma ona być równa $\|\mathbf{w}\| = 1/M$. Teraz możemy zmienić cel zadania: zamiast szukać maksymalnego marginesu, szukamy minimalnej długości $\|\mathbf{w}\|$.

Przekształcamy nierówność (*):

$$\frac{y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + w_0)}{\|\mathbf{w}\|} \geq M \quad \rightarrow \quad \frac{y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + w_0)}{1/M} \geq M \quad \rightarrow \quad y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + w_0) \geq 1, \quad \forall i \qquad (**)$$

Funkcja celu

Problem optymalizacyjny zapiszemy następująco:

$$\min \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \quad \text{pod warunkiem} \quad y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + w_0) \geq 1, \quad \forall i$$

Jest to typowy problem optymalizacji kwadratowej (kwadratowa funkcja celu), który rozwiązuje się metodą Lagrange'a*. Metoda ta polega na wprowadzeniu funkcji Lagrange'a, która jest sumą oryginalnej funkcji celu i ograniczeń (dla każdego punktu) przemnożonych przez mnożniki $\alpha_i \geq 0$:

$$L_P(\mathbf{w}, w_0, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{N}\alpha_i[y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + w_0) - 1] = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + w_0) + \sum_{i=1}^{N}\alpha_i \qquad (\#)$$

Funkcja jest minimalizowana ze względu na **w** i w_0 :

$$\frac{\partial L_P}{\partial \mathbf{w}} = 0 \quad \rightarrow \quad \mathbf{w} = \sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i \mathbf{x}_i \qquad (\#\#)$$

$$\frac{\partial L_P}{\partial w_0} = 0 \quad \rightarrow \quad \sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i = 0$$

* Opis metody w: Kusiak J. i In.: Optymalizacja. PWN 2009, str. 121.

Funkcja celu

Podstawiamy wyniki tej optymalizacji do (#) i otrzymujemy (tzw. postać dualną funkcji *L*):

$$L_D = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\alpha_i\alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j + \sum_{i=1}^{N}\alpha_i$$

Teraz maksymalizujemy tę funkcję ze względu na α_i przy ograniczeniach: $\sum_{i=1}^{N}\alpha_i y_i = 0$ i $\alpha_i \geq 0$, $\forall i$.

W wyniku otrzymujemy zbiór mnożników α_i, przy czym tylko niektóre z nich mają wartości większe od zera. Pozostałe są wyzerowane. Te niezerowe mnożniki odpowiadają wektorom nośnym (punktom, na których opiera się margines).

Mając wartości α_i z (##) możemy wyznaczyć wektor normalny płaszczyzny separującej:

$$\mathbf{w} = \sum_{i\in\Omega}\alpha_i y_i \mathbf{x}_i$$

gdzie Ω jest zbiorem indeksów wektorów nośnych.

Reguła decyzyjna

Płaszczyzny przechodzące przez wektory nośne (ograniczające margines) mają postać:

$$y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + w_0) = 1, \quad i \in \Omega$$

Stąd:

$$w_0 = y_i - \mathbf{w}^T\mathbf{x}_i, \quad i \in \Omega$$

Zauważ, że współczynniki płaszczyzny dyskryminacyjnej zależą jedynie od wektorów nośnych i są niezależne od punktów leżących dalej (usunięcie tych punktów nie wpłynie na powierzchnię decyzyjną).

Przedstawiony algorytm klasyfikacji nosi nazwę maszyny wektorów nośnych (*Support Vector Machine*, SVM).

Ostatecznie reguła decyzyjna SVM przyjmuje postać:

$$f(\mathbf{x}) = \operatorname{sgn}(\mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0) = \operatorname{sgn}\left(\sum_{i\in\Omega} \alpha_i y_i (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}) + w_0\right)$$

gdzie: sgn(z) oznacza +1, gdy z > 0 i –1, gdy z < 0, a $(\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x})$ to iloczyn skalarny dwóch wektorów.

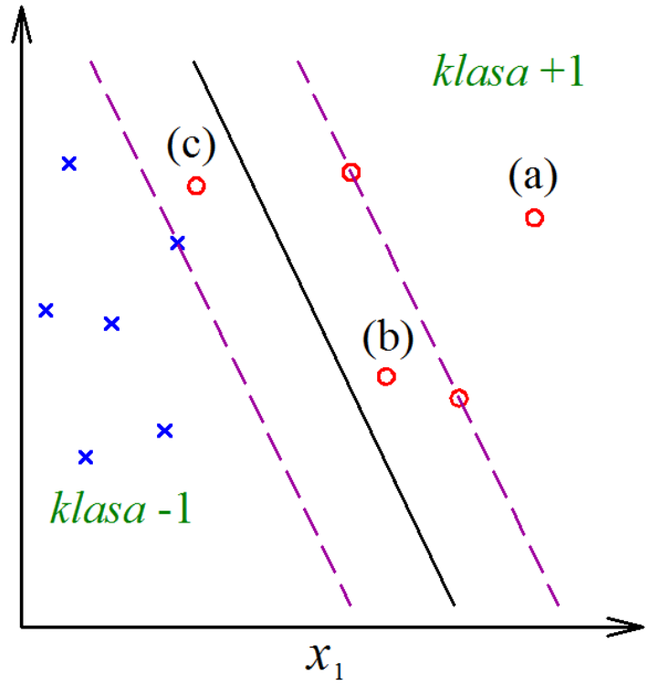
Dane nieseparowalne liniowo

W przypadku danych nieseparowalnych liniowo poszukujemy płaszczyzny, która rozdziela obszary decyzyjne z najmniejszym błędem.

Osłabiamy ograniczenia (**):

$$y_i(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + w_0) \geq 1 - \xi_i, \quad \forall i \quad (@)$$

- gdy $\xi_i = 0$, $\mathbf{x}_i$ jest klasyfikowany poprawnie i leży poza marginesem lub na jego granicy (a),
- gdy $0 < \xi_i < 1$, $\mathbf{x}_i$ jest klasyfikowany poprawnie, ale leży na marginesie (b),
- gdy $\xi_i > 1$, $\mathbf{x}_i$ jest klasyfikowany błędnie (c).



Zdefiniujmy "miękki" błąd jako $\sum_{i=1}^{N} \xi_i$ i dodajmy go jako składnik karny do funkcji celu:

$$\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i$$

Szukamy minimum tej funkcji przy ograniczeniach (@) oraz $\xi_i \geq 0$. Hiperparametr $C \geq 0$ decyduje o "sile" kary.

Dane nieseparowalne liniowo

W innym wariancie, SVM odwzorowuje dane nieseparowalne liniowo do nowej przestrzeni i stosuje hiperpłaszczyznę do separacji klas. Zdefiniujmy nowe przykłady **z** = [z_1, z_2, ..., z_m], przekształcając **x** za pomocą funkcji bazowej (wektorowej) **φ**(**x**):

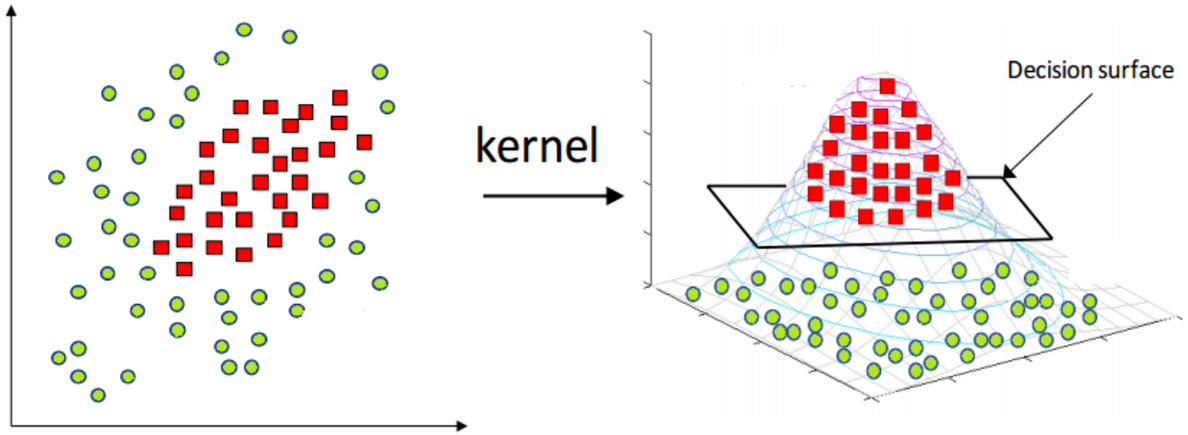
$$\mathbf{z} = \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}), \quad z_k = \varphi_k(\mathbf{x}), \quad k = 1,2,\ldots,m$$

Przechodzimy z *n*-wymiarowej przestrzeni *X* do *m*-wymiarowej przestrzeni *Z* (*m* > *n*).

Równania płaszczyzn dyskryminacyjnych mają w *Z* postać (pomijamy w zapisie w_0, przyjmując $z_1 = \varphi_1(\mathbf{x}) = 1$):

$$f(\mathbf{z}) = \mathbf{w}^T\mathbf{z},$$

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{m} w_k\varphi_k(\mathbf{x})$$



Funkcja celu ma taką sama postać jak poprzednio:

$$\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i$$

ale ograniczenia są zdefiniowane w nowej przestrzeni:

$$y_i\mathbf{w}^T\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i) \geq 1 - \xi_i, \quad \forall i$$

Maszyna jądrowa

Postać dualna lagrangianu:

$$L_D = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i)^T \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_j)$$

przy ograniczeniach: $\sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i = 0$ i $0 \leq \alpha_i \leq C, \ \forall i$.

Ideą maszyn jądrowych jest zastąpienie iloczynu skalarnego $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i)^T \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_j)$ funkcją jądrową $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ oryginalnych przykładów. Zamiast odwzorowywać przykłady $\mathbf{x}$ za pomocą funkcji $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$ na przestrzeń Z i wyznaczać iloczyn skalarny w tej przestrzeni, stosujemy funkcję jądrową działającą bezpośrednio na przykładach $\mathbf{x}$ (*kernel trick*):

$$L_D = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

Płaszczyznę dyskryminacyjną możemy zapisać:

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i) \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$$

Klasyfikator wykorzystujący ten mechanizm nazywa się maszyną jądrową.

Przypadek wielu klas

Gdy liczba klas $K > 2$ konstruujemy K klasyfikatorów SVM. Każdy z nich separuje jedną klasę od pozostałych. Każdy więc tworzy powierzchnię dyskryminacyjną oddzielającą przykłady klasy l-tej (którym nadaje się etykietę +1) od przykładów z pozostałych klas (którym nadaje się etykietę –1):

$$f_l(\mathbf{x}) = \sum_{i \in \Omega_l} \alpha_i^l y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$$

W trakcie klasyfikacji nowego przykładu wyznaczamy wartości funkcji decyzyjnych utworzonych przez wszystkie klasyfikatory SVM. Funkcja zwracająca największą wartość wskazuje klasę przykładu:

$$f_l(\mathbf{x}) = \arg\max_{l=1,2,\ldots,K} \left\{ \sum_{i \in \Omega_l} \alpha_i^l y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) \right\}$$

Alternatywnym podejściem jest konstrukcja $K(K–1)/2$ klasyfikatorów separujących klasy parami (każda z każdą).

Funkcje jądrowe

Funkcje jądrowe w SVM

- wielomian stopnia *q*:

$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = (\mathbf{x}^T \mathbf{x}_i + 1)^q$$

Dla $q = 2$ i $n = 2$:

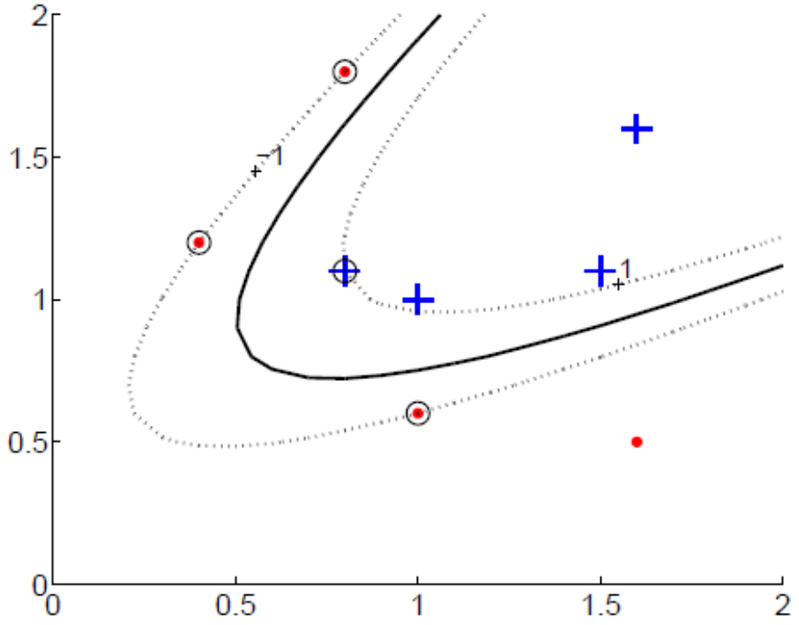
$$K(\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_b) = (\mathbf{x}_a^T \mathbf{x}_b + 1)^2 = (x_{a,1}x_{b,1} + x_{a,2}x_{b,2} + 1)^2 = 1 + 2x_{a,1}x_{b,1} + 2x_{a,2}x_{b,2} + 2x_{a,1}x_{b,1}x_{a,2}x_{b,2} + x_{a,1}^2 x_{a,2}^2 + x_{b,1}^2 x_{b,2}^2$$

Odpowiada to iloczynowi skalarnemu funkcji bazowych postaci:

$$\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) = [1, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1x_2, x_1^2, x_2^2]^T$$

(Ale te funkcje nie muszą być znane, wystarczy znać jądro!)

W takim przypadku powierzchnia decyzyjna w przestrzeni *X* ma postać →



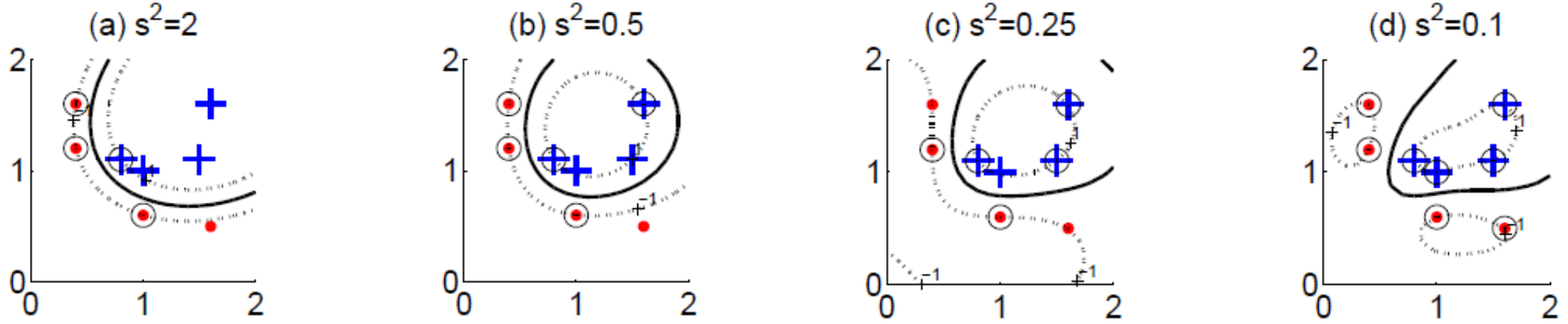
Funkcje jądrowe

- radialna funkcja bazowa:

$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}\|}{2s^2}\right)$$

Parametr *s* - szerokość funkcji radialnej dobieramy w kroswalidacji.

Różne powierzchnie decyzyjne w zależności od parametru *s*:



- jądro sigmoidalne:

$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \tanh(2\mathbf{x}^T\mathbf{x}_i + 1)$$

Funkcje jądrowe

Funkcje jądrowe mierzą podobieństwo pomiędzy przykładami. Im przykłady są do siebie bardziej podobne tym wartość funkcji jądrowej jest większa (maksymalna dla identycznych przykładów).

Możemy definiować jądra specyficzne dla danego problemu. Poprzez odpowiednio zdefiniowane jądra możemy wprowadzać dodatkową wiedzę o problemie (*kernel engineering*).

Zależnie od sposobu reprezentacji danych możemy tworzyć jądra łańcuchowe (*string kernels*), drzewiaste (*tree kernels*), grafowe (*graph kernels*).

Na przykład, gdy analizujemy dwa dokumenty, jądrem może być liczba jednakowych słów pojawiająca się w tych dokumentach.

Typowo dla dwóch dokumentów D_1 i D_2 określa się listę H słów i definiuje funkcję $\varphi(D)$ jako H-wymiarowy wektor binarny. Jedynka na pozycji i-tej w tym wektorze oznacza, że i-te słowo z listy występuje w dokumencie. Iloczyn skalarny $\varphi(D_1)^T\varphi(D_2)$ wyznacza liczbę słów jednakowych w obu dokumentach. Jeśli bezpośrednio zdefiniujemy jądro $K(D_1, D_2)$ jako liczbę słów wspólnych, nie musimy wyznaczać listy H słów.

SVM do regresji

Rozważmy model regresji liniowej:

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + w_0$$

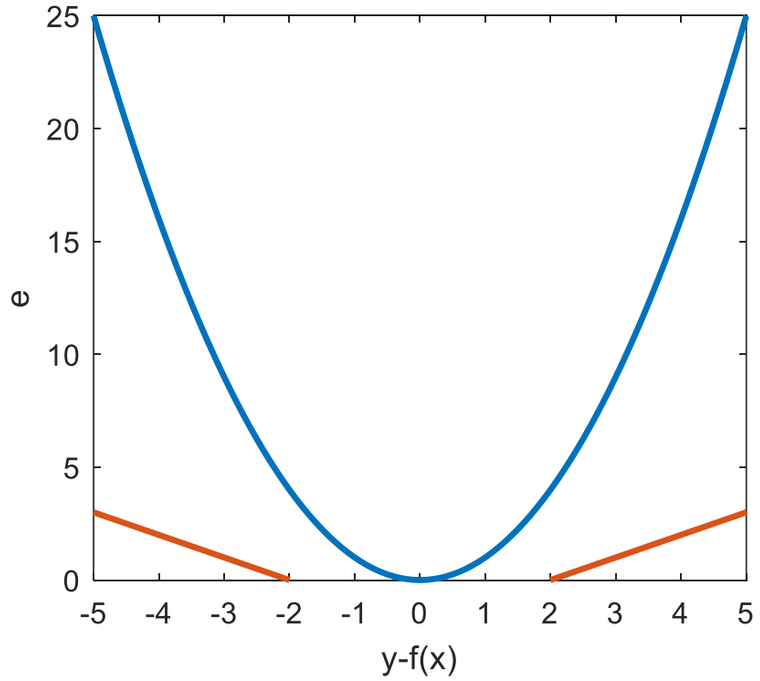
W regresji używamy błędu kwadratowego:

$$e_2(y_i, f(\mathbf{x}_i)) = (y_i - f(\mathbf{x}_i))^2$$

Natomiast w SVM błąd definiujemy następująco:

$$e_\varepsilon(y_i, f(\mathbf{x}_i)) = \begin{cases} 0, & \text{jeżeli } |y_i - f(\mathbf{x}_i)| < \varepsilon \\ |y_i - f(\mathbf{x}_i)| - \varepsilon, & \text{w przeciwnym przypadku} \end{cases}$$

co oznacza, że tolerujemy błędy mniejsze od ε i błąd jest liniowy, nie kwadratowy.



SVM do regresji

Analogicznie do klasyfikatora SVM dla danych nieseparowanych definiujemy "miękki" błąd i dodajemy go do funkcji celu:

$$\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{N}(\xi_{i+} + \xi_{i-})$$

Ograniczenia:

$$y_i - (\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + w_0) \le \varepsilon + \xi_{i+}$$
$$(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + w_0) - y_i \le \varepsilon + \xi_{i-}$$
$$\xi_{i+}, \xi_{i-} \ge 0$$

gdzie zmienne ξ_{i+} i ξ_{i-} dotyczą dodatnich i ujemnych odchyłek, odpowiednio.

SVM do regresji

Lagrangian ma postać:

$$L_P(\mathbf{w}, w_0, \boldsymbol{\alpha}_+, \boldsymbol{\alpha}_-, \boldsymbol{\mu}_+, \boldsymbol{\mu}_-) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{N}(\xi_{i+} + \xi_{i-}) - \sum_{i=1}^{N}\alpha_{i+}[\varepsilon + \xi_{i+} - y_i + (\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + w_0)]$$
$$- \sum_{i=1}^{N}\alpha_{i+}[\varepsilon + \xi_{i-} + (\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + w_0) - y_i] - \sum_{i=1}^{N}(\mu_{i+}\xi_{i+} + \mu_{i-}\xi_{i-})$$

Przyrównując pochodne L_P po $\mathbf{w}$, w_0 i ξ_i do zera otrzymujemy:

$$\frac{\partial L_P}{\partial \mathbf{w}} = 0 \quad \rightarrow \quad \mathbf{w} = \sum_{i=1}^{N}(\alpha_{i+} + \alpha_{i-})\mathbf{x}_i \,, \qquad \frac{\partial L_P}{\partial w_0} = 0 \quad \rightarrow \quad \sum_{i=1}^{N}(\alpha_{i+} + \alpha_{i-})\mathbf{x}_i = 0$$

$$\frac{\partial L_P}{\partial \xi_{i+}} = 0 \quad \rightarrow \quad C - \alpha_{i+} - \mu_{i+} = 0 \,, \qquad \frac{\partial L_P}{\partial \xi_{i-}} = 0 \quad \rightarrow \quad C - \alpha_{i-} - \mu_{i-} = 0$$

Podstawiając powyższe do L_P otrzymamy postać dualną:

$$L_D = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}(\alpha_{i+} + \alpha_{i-})(\alpha_{j+} + \alpha_{j-})\mathbf{x}_i^T\mathbf{x}_j - \varepsilon\sum_{i=1}^{N}(\alpha_{i+} + \alpha_{i-}) - \sum_{i=1}^{N}y_i(\alpha_{i+} + \alpha_{i-})$$

przy ograniczeniach: : $\sum_{i=1}^{N}(\alpha_{i+} - \alpha_{i-}) = 0, 0 \le \alpha_{i+}, \alpha_{i-} \le C, \forall i$.

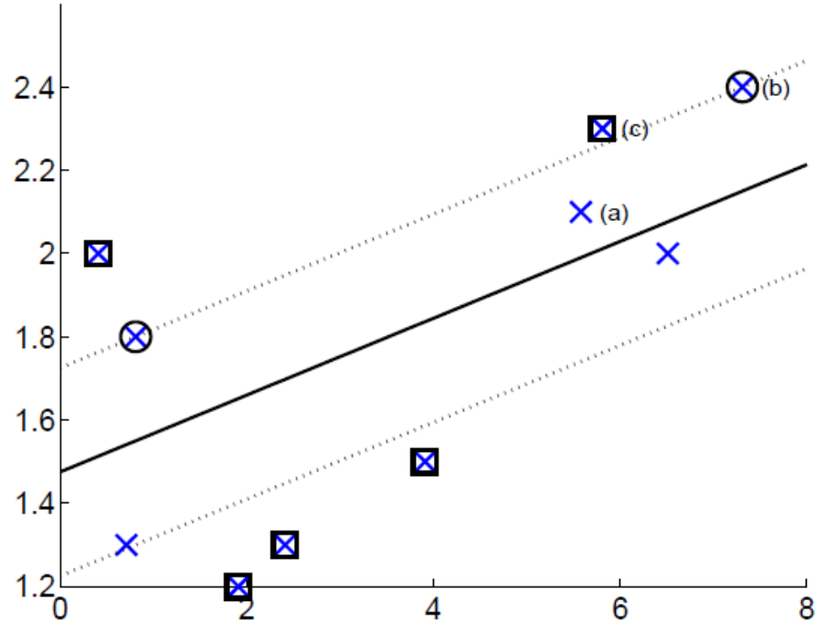
SVM do regresji

Maksymalizujemy L_D ze względu na mnożniki α_i i w wyniku otrzymujemy:

a) $\alpha_{i+} = \alpha_{i-} = 0$ dla punktów leżących w paśmie pomiędzy płaszczyznami granicznymi marginesu; są to punkty aproksymowane z akceptowalnym błędem,

b) $0 < \alpha_{i+} < C$ lub $0 < \alpha_{i-} < C$ dla punktów leżących na płaszczyznach granicznych marginesu,

c) $\alpha_{i+} = C$ lub $\alpha_{i-} = C$ dla punktów leżących poza pasmem marginesu; są to punkty aproksymowane z nieakceptowalnym błędem ($>\varepsilon$).



SVM do regresji

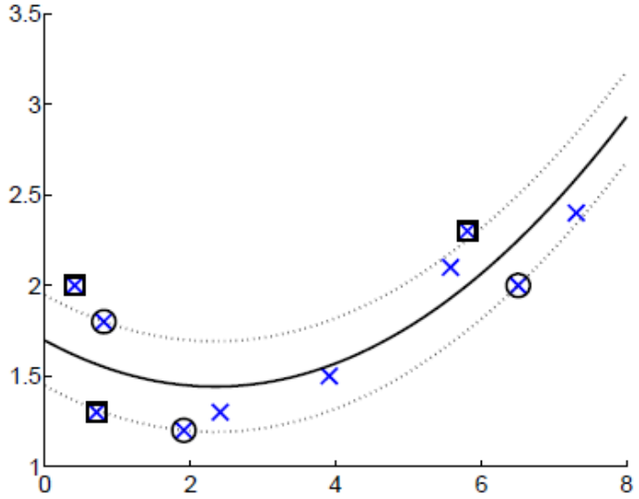
Wektorami nośnymi nazywa się punkty, dla których $\alpha_i > 0$. Punkty te definiują wektor normalny **w** płaszczyzny aproksymacyjnej. Wartości w_0 wyznaczamy na podstawie punktów leżących na granicach marginesu z równania $y_i = \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + w_0 \pm \varepsilon$.

Funkcja aproksymująca zależy jedynie od wektorów nośnych:

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + w_0 = \sum_{i=1}^{N} (\alpha_{i+} + \alpha_{i-}) \mathbf{x}_i^T \mathbf{x} + w_0$$

Iloczyn skalarny $\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$, podobnie jak w przypadku klasyfikatora, zastępujemy jądrem $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$, co umożliwi aproksymację nieliniową:

jądro wielomianowe



jądro radialne