

Содержание

1	Постановка задачи	2
2	Основная часть	3
2.1	Метод опорных векторов в случае полностью разделимой выборке	3
2.2	Метод опорных векторов в пространстве признаков.	5
2.3	Ядра и спрямляющие пространства.	7
2.4	Метод опорных веторов в случае неразделимой выборки. Случай линейной нормы.	10
2.5	Разметка препятствий и запуск на библиотечной реализации SVM	12
2.6	Реализация SVM с помощью svxopt	15
2.7	Реализация SVM с помощью SMO.	18
2.8	Извлечение координат траектории и подсчет точек пути. .	23
3	Библиографические ссылки.	25

1 Постановка задачи

Цель работы: Изучить метод опорных векторов (SVM) и его применение для построения траектории движения.

- Изучить метод опорных векторов для случая полностью разделимой выборки.
- Рассмотреть SVM метод в пространстве признаков.
- Рассмотреть случай неразделимой выборки.
- С помощью метода опорных векторов построить траекторию обхода препятствий.

2 Основная часть

2.1 Метод опорных векторов в случае полностью разделимой выборке

Рассмотрим задачу бинарной классификации для полностью разделимой выборки $S = ((\vec{x}_1, y_1), (\vec{x}_2, y_2), \dots, (\vec{x}_l, y_l))$, где $\vec{x}_i \in \mathbb{R}^n$ и $y_i \in \{-1, 1\}$ попытаемся разделить её гиперплоскостью $(\vec{\omega} \cdot \vec{x}) - c = 0$.

Полностью разделимая выборка - это выборка, которую можно без ошибок разделить гиперплоскостью.

Наша основная цель в этой части найти оптимальную разделяющую гиперплоскость, которая будет находится точно в середине между ближайшими сверху и снизу точками положительной и отрицательной частей выборки, поэтому будем искать максимум непрерывной функции $\rho(\vec{\omega})$ на компакте $\{\vec{\omega} : \|\vec{\omega}\| \leq 1\}$.

Такая гиперплоскость действительно существует, в силу доказанных лемм в [1].

Найденную гиперплоскость $(\omega_0 \cdot \vec{x}) - c_0 = 0$ уже назовем оптимальной.

Теперь, выяснив что такое оптимальная гиперплоскость, построим метод построения оптимальной гиперплоскости как задачу квадратичного программирования, рассмотрев её альтернативное математическое определение:

$$y_i((\vec{\omega} \cdot \vec{x}_i) + b) \geq 1 \quad (2.1.4)$$

где $i = 1, \dots, l$, и величина $\|\vec{\omega}_0\|$ была бы минимальна при этих ограничениях.

Для такой задачи составим лагранжиан:

$$L(\vec{\omega}, b, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2}(\vec{\omega} \cdot \vec{\omega}) - \sum_{i=1}^l \alpha_i (y_i((\vec{\omega} \cdot \vec{x}_i) + b) - 1) \quad (2.1.5)$$

Для поиска седловой точки лагранжиана данный функционал необходимо минимизировать по $\vec{\omega}$ и b , а после максимизировать по множителям

Лагранжа, при условиях $\alpha_i \geq 0, i = 1, \dots, l$. Возьмем производные:

$$\frac{\partial L(\vec{\omega}, b, \vec{\alpha})}{\partial \vec{\omega}} = \vec{\omega} - \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i \vec{x}_i = \vec{0}, \quad (2.1.6)$$

$$\frac{\partial L(\vec{\omega}, b, \vec{\alpha})}{\partial b} = \sum_{i=1}^l \alpha_i y_i = 0 \quad (2.1.7)$$

Определим

$$W(\vec{\alpha}) = L(\vec{\omega}, b, \vec{\alpha}) \quad (2.1.8)$$

Теперь подставим полученные производные в изначальный лагранжиан:

$$W(\vec{\alpha}) = \sum_{i=1}^l \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^l \alpha_i \alpha_j y_i y_j (\vec{x}_i \cdot \vec{x}_j) \quad (2.1.9)$$

Получается, что надо максимизировать функционал выше, при условии:

$$\sum_{i=1}^l \alpha_i y_i = 0 \quad (2.1.10)$$

И учитывать также, что $\alpha_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, l$

Допустим, мы нашли наши решения ω_0 и b_0 . Но в задачах нелинейного программирования накладываются дополнительные необходимые условия Каруша-Куна-Таккера. В данной задаче:

$$\alpha_i^0 (y_i ((\vec{\omega}_0 \cdot \vec{x}_i) + b_0) - 1) = 0 \quad (2.1.11)$$

для $i = 1, \dots, l$

Отсюда следует, что $\alpha_i^0 > 0$ может быть только для тех i , для которых $y_i ((\vec{\omega}_0 \cdot \vec{x}_i) + b_0) - 1 = 0$, т.е. для тех векторов, которые лежат на самих гиперплоскостях $(\vec{\omega}_0 \cdot \vec{x}_i) + b_0 = \pm 1$. Такие векторы называются опорными векторами.

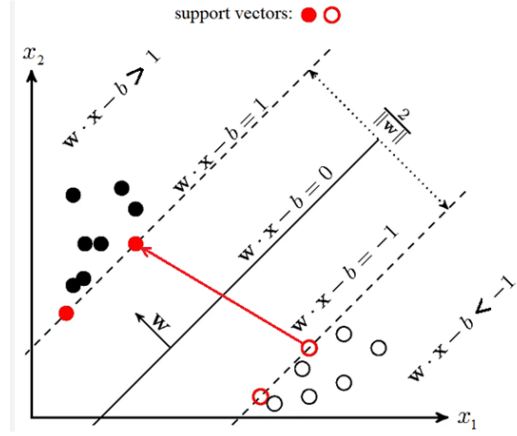


Рис. 1: Опорные векторы

$\vec{\omega}_0$ представляет собой линейную комбинацию опорных векторов \vec{x}_{i_s} , $s = 1, \dots, k$, где k число опорных векторов:

$$\vec{\omega}_0 = \sum_{s=1}^k \alpha_{i_s}^0 y_{i_s} \vec{x}_{i_s}. \quad (2.1.12)$$

А оптимальная гиперплоскость имеет вид:

$$\sum_{s=1}^k \alpha_{i_s}^0 y_{i_s} (\vec{x}_{i_s} \cdot \vec{x}) + b_0 = 0 \quad (2.1.13)$$

2.2 Метод опорных векторов в пространстве признаков.

В данной части мы будем рассматривать ту же выборку $S = ((\vec{x}_1, y_1), (\vec{x}_2, y_2), \dots, (\vec{x}_l, y_l))$, где $\vec{x}_i \in \mathbb{R}^n$ и $y_i \in \{-1, 1\}$. Но зададим некоторое нелинейное отображение из пространства признаков в пространство более высокой размерности:

$$\vec{x} = (x_1, \dots, x_n) \rightarrow \vec{\phi} = (\phi_1(\vec{x}), \dots, \phi_N(\vec{x})). \quad (2.2.1)$$

Отображение необязательно должно быть необратимым в данном случае.

И уже в новом пространстве признаков размерности \mathbb{R}^N будет строиться оптимальная гиперплоскость, разделяющая векторы $\vec{\phi}(\vec{x}_1), \dots, \vec{\phi}(\vec{x}_l)$.

Положим $z_j = \phi_j(\vec{x})$, где $j = 1, \dots, N$, или в координатном виде $z_j \in \mathbb{R}^N$.

Теперь будем строить гиперплоскость в пространстве признаков \mathbb{R}^N по известному алгоритму из части 2.1. Эта гиперплоскость имеет своим прообразом в пространстве \mathbb{R}^N в общем случае нелинейную поверхность.

$$\sum_{j=1}^N \omega_j \phi_j(\vec{x}) + b = 0 \quad (2.2.2)$$

По аналогии с тем как мы составляли вектор весов $\vec{\omega}$ в части выше, запишем то же самое и для данного случая в координатном виде.

$$\omega_j = \sum_{i=1}^l \alpha_i^0 y_i \phi_j(\vec{x}_i) \quad (2.2.3)$$

Теперь подставим (2.1.15) в (2.1.14) и получим, опуская выкладки:

$$\sum_{j=1}^N \omega_j \phi_j(\vec{x}) + b = \sum_{i=1}^l \alpha_i^0 y_i (\vec{\phi}(\vec{x}) \cdot \vec{\phi}(\vec{x}_i)) + b = \sum_{i=1}^l \alpha_i^0 y_i K(\vec{x}, \vec{x}_i) + b = 0 \quad (2.2.4)$$

где

$$K(\vec{x}, \vec{x}_i) = (\vec{\phi}(\vec{x}) \cdot \vec{\phi}(\vec{x}_i)) \quad (2.2.5)$$

В конечном итоге, мы пришли к тому что можем разделять данные не только линейными поверхностями, но и нелинейными, путем замены скалярного произведения на функцию ядра $K(\vec{x}, \vec{x}_i)$. При этом нам не нужно знать отображение $\vec{x} \rightarrow \vec{\phi}(\vec{x})$, а достаточно только знать ядро.

Запишем также вид нашей упрощенной функции $W(\alpha)$, которую мы минимизируем:

$$W(\alpha) = \sum_{i=1}^l \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(\vec{x}_i, \vec{x}_j). \quad (2.2.6)$$

На практике подбираются ядра, для которых соответствующая поверхность наилучшим образом разделяет обучающую выборку.

2.3 Ядра и спрямляющие пространства.

Исследуем новую задачу: Как строить функцию ядра? Джеймс Мерсер доказал теорему, которая даёт ответ.

Теорема. Функция $K(x, x')$ является ядром \Leftrightarrow когда она симметрична и неотрицательно определена:

$$\int_X \int_X K(x, x') g(x) g(x') dx dx' \geq 0 \quad (2.3.1)$$

Функция $K(x, x')$ неотрицательно неопределена, если для любой конечной выборки $X^p = (x_1, \dots, x_p)$ из X матрица $K = \|K(x_i, x_j)\|$ неотрицательно определена: $z^K z \geq 0 \forall z \in \mathbb{R}^p$

Существуют конструктивные правила построения ядра [2], но всё же задача подбора ядра для какой-либо конкретной задачи открыта.

Ниже приведены примеры стандартных ядерных функций, в моей работе наиболее эффективное применение нашло **гауссово ядро RBF**.

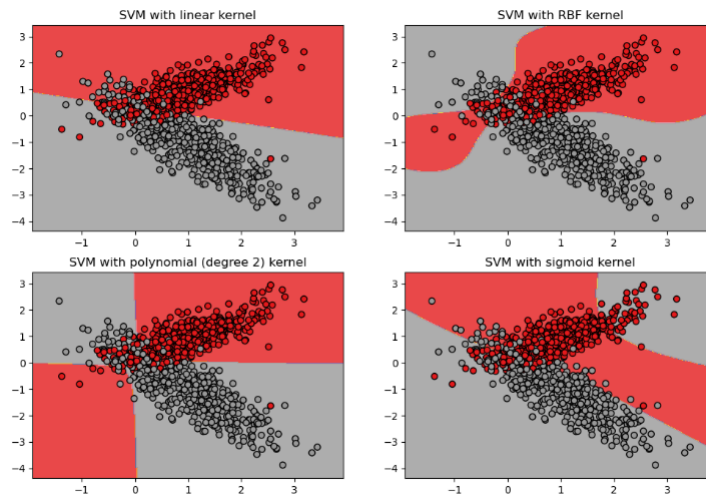


Рис. 2: Применение ядра

Линейное, просто вычисляет скалярное произведение векторов в исходном пространстве, что эквивалентно обычному линейному классификатору:

$$x_i \cdot x_j \quad (2.3.2)$$

Полиномиальное — способно улавливать более сложные зависимости между данными, создавая оптимальную разделяющую гиперплоскость в новом пространстве, однако требуется тщательный подбор параметров :

$$(\gamma x_i \cdot x_j + r)^d \quad (2.3.3)$$

Гауссовское RBF (радиально-базисная функция) — хорошо подходит для случаев, когда отношение в данных имеет сложную нелинейную форму и менее подвержено переобучению, поскольку учитывает не только значения признаков, но и их распределение:

$$\exp(-\gamma \|x_i - x_j\|^2) \quad (2.3.4)$$

γ влияет на следующие аспекты: 1) Сила влияния расстояния: Чем больше γ , тем сильнее влияние расстояния между точками на значение ядра. Это означает, что точки, которые находятся ближе друг к другу, будут иметь более сильное влияние на решение задачи.

2) Ширина области влияния: Чем меньше γ , тем шире область влияния каждого опорного вектора. Это означает, что каждый опорный вектор будет иметь более широкое влияние на решение задачи в пространстве

признаков.

3) Чувствительность к шуму: Чем больше γ , тем более чувствительна модель к шуму в данных. Если γ слишком велико, модель может начать учитывать шум в данных, что может привести к переобучению.

4) Количество опорных векторов: Чем больше γ , тем меньше опорных векторов будет выбрано моделью. Это может привести к уменьшению сложности модели и времени ее обучения.

5) Область применимости: Чем меньше γ , тем более широкой будет область применимости модели. Это может быть полезно в случаях, когда необходимо предсказывать значения в областях, которые не были представлены в обучающей выборке.

6) Сглаживание решений: Чем меньше γ , тем более сглаженным будет решение задачи. Это может быть полезно в случаях, когда необходимо сгладить локальные минимумы и максимумы в решении.

По умолчанию используется $\gamma = \frac{1}{N}$, N - число признаков.

Сигмоидальное — применяет гиперболический тангенс к линейной комбинации векторов, имитируя использование двухслойной нейронной сети с сигмоидальной функцией активации, что также позволяет хорошо работать со сложными нелинейными случаями, однако это может привести к переобучению в случае появления шума и выбросов:

$$\tanh(\gamma x_i \cdot x_j + r) \quad (2.3.5)$$

2.4 Метод опорных векторов в случае неразделимой выборки. Случай линейной нормы.

В данной части будем рассматривать случай, когда наша выборка $S = ((\vec{x}_1, y_1), (\vec{x}_2, y_2), \dots, (\vec{x}_l, y_l))$, где $\vec{x}_i \in \mathbb{R}^n$ и $y_i \in \{-1, 1\}$ не разделимая, в таком случае вводятся вспомогательные переменные мягкого отступа ξ_i , $i = 1, \dots, l$, которые будут как бы "штрафовать" объекты выборки за пересечение граничных гиперплоскостей их класса, при этом мы как бы разрешаем нашим объектам ошибаться.

На практике чаще используют линейную норму ошибок.

$$\frac{1}{2}(\vec{\omega} \cdot \vec{\omega}) + C \sum_{i=1}^l \xi_i \rightarrow \min_{\omega, \omega_0, \xi} \quad (2.5.1)$$

$$y_i((\omega, x_i) - b) \geq 1 - \xi_i, i = 1, \dots, l \quad (2.5.2)$$

$$\xi_i \geq 0, i = 1, \dots, l \quad (2.5.3)$$

Введём понятие отступа объекта x_i :

$$m_i = y_i((\omega, x_i) - b) \quad (2.5.4)$$

Алгоритм допускает ошибку на объекте x_i тогда и только тогда, когда отступ m_i отрицателен. Если $m_i \in (-1, +1)$, то объект x_i попадает внутрь разделяющей полосы. Если $m_i > 1$, то объект x_i классифицируется правильно, и находится на некотором удалении от разделяющей полосы.

Тогда можно ввести функционал числа ошибок нашего алгоритма, который помимо прочего чувствителен к ошибкам:

$$Q(a, X^l) = \sum_{i=1}^l (1 - m_i)_+ + \tau \|\omega\|^2 \rightarrow \min_{\omega, b} \quad (2.5.5)$$

Новый полученный лагранжиан:

$$L(\omega, \omega_0, \xi, \lambda, \eta) = \frac{1}{2}(\omega, \omega) - \sum_{i=1}^l \lambda_i (y_i((\omega, x_i) - b) - 1) - \sum_{i=1}^l \xi_i (\lambda_i + \eta_i - C) \quad (2.5.6)$$

где $\eta = (\eta_1, \dots, \eta_l)$ — вектор переменных, двойственных к переменной $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_l)$. Как и в прошлый раз, условия Куна-Таккера сводят задачу

к поиску седловой точки функции Лагранжа:

$$\begin{cases} L(\omega, \omega_0, \xi, \lambda, \eta) \rightarrow \min_{\omega, b, \xi} \max_{\lambda, \eta} \\ \xi_i \geq 0, \lambda_i \geq 0, \eta \geq 0, i = 1, \dots, l \\ y_i((\omega, x_i) - b) = 1 - \xi_i, i = 1, \dots, l \\ \xi_i = 0, i = 1, \dots, l \end{cases} \quad (2.5.7)$$

При подсчете производных получаем те же результаты что и в линейном случае, кроме:

$$\eta_i + \lambda_i = C, i = 1, \dots, l \quad (2.5.8)$$

Из условий $\eta_i \geq 0$ следует ограничение $\lambda_i \leq C$. И получается, что возможны три типа объектов.

- $\lambda_i = 0; \eta_i = C; \xi_i = 0; m_i = 1$: Объект x_i классифицируется правильно и находится далеко от разделяющей полосы.
- $0 < \lambda_i < C; 0 < \eta_i < C; \xi_i = 0; m_i = 1$: Объект x_i классифицируется правильно и лежит в точности на границе разделяющей полосы.
- $\lambda_i = C; \eta_i = 0; \xi_i > 0; m_i < 1$: Объект x_i либо лежит внутри разделяющей полосы, но классифицируется правильно

$$(0 < \xi_i < 1, 0 < m_i < 1)$$

, либо попадает на границу классов ($\xi_i = 1, m_i = 0$), либо вообще относится к чужому классу ($\xi_i > 1, m_i < 0$).

$$\begin{cases} -L(\lambda) = -\sum_{i=1}^n \lambda_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \lambda_j y_i y_j (x_i \cdot x_j) \rightarrow \min_{\lambda} \\ 0 \leq \lambda_i \leq C, (1 \leq i \leq n) \\ \sum_{i=1}^n \lambda_i y_i = 0. \end{cases} \quad (2.5.9)$$

2.5 Разметка препятствий и запуск на библиотечной реализации SVM

Опираясь на статью[3] применим алгоритм построения оптимальной гиперплоскости для задачи планирования пути с учетом наличия препятствий. Суть алгоритма заключается в классификации препятствий на те, что следует обойти слева и те, что следует обойти справа. В этом случае разделяющая кривая будет являться путем, свободным от препятствий.

Алгоритм планирования пути можно описать следующим образом:

1) Разметка препятствий. Все препятствия должны быть помечены как положительные или отрицательные перед применением SVM. Один из способов - протестировать все возможные варианты меток и выбрать наилучший, который обеспечивает кратчайший путь или же использовать рандомизированный подход, при котором случайным образом выбирается и тестируется ограниченное количество шаблонов препятствий (обозначений). Однако наибольшую эффективность (особенно по времени работы) показал алгоритм, согласно которому проводится линия от начальной до конечной точки: препятствия, центр масс которых оказался выше проведенной линии относятся к классу "1 остальные - к классу 1".

Пусть $(x_0, y_0) = (0, 0)$ - начальная точка, (x_1, y_1) - конечная точка. Уравнение прямой, соединяющей эти точки: $y = \frac{y_1}{x_1} \cdot x$

$c = (c_x, c_y) = (\frac{1}{n} \cdot \sum_i^n (x_i); \frac{1}{n} \cdot \sum_i^n (y_i))$ - центр масс препятствия,
 $label = np.where(\frac{y_1}{x_1} \cdot c_x > c_y, 1, -1)$

2) Устанавливаем виртуальные препятствия вокруг начальной и конечной точек. (рис. 4)

3) Устанавливаются направляющие выборки, чтобы охватить возможную пройденную область, а так же минимизировать длину пути. В нашем коде направляющие выборки генерируются как линии (точнее, группы точек), параллельные прямой, соединяющей начальную и конечную точки. (рис. 4)

4) Применение SVM к сгенерированным выборкам и извлечение пути.

1. Запуск на библиотечной реализации SVM (rbf kernel)

```
rbf_svc = svm.SVC(kernel='rbf', C=10,  
    ↪ probability=True).fit(x_train, label)  
print('Accuracy of RBF kernel:', accuracy_score(label,  
    ↪ rbf_svc.predict(x_train)))
```

Вывод: Accuracy of RBF kernel: 0.9901186071817193

Скорость работы: менее 1 секунды на датасете из 900 объектов.

Визуализация:

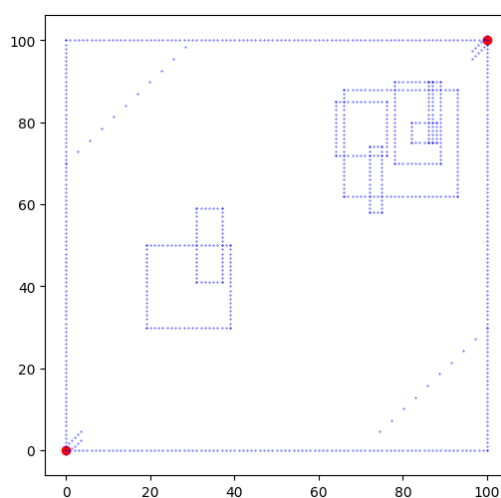


Рис. 3

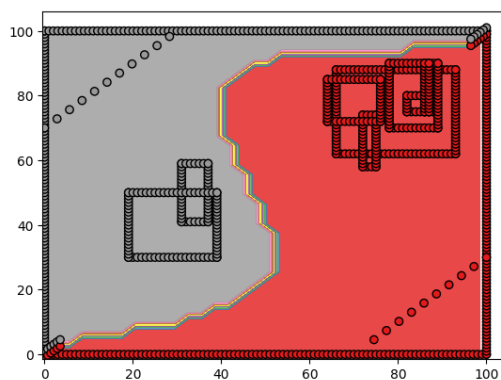


Рис. 4

Параметр C отвечает за важность штрафа за ошибки классификации в задаче оптимизации SVM. Чем выше значение C , тем более важным

становится штраф за ошибки классификации, и модель будет пытаться минимизировать количество ошибок классификации. Это может привести к переобучению модели. В нашей работе оптимальное $1 \leq C \leq 20$.

2.6 Реализация SVM с помощью svxopt

2. Теперь реализуем классификатор SVM. Система (2.5.9) представляет из себя задачу квадратичного программирования. Для ее решения воспользуемся библиотекой svxopt. Svхopt решает задачу, записанную в виде:

$$\begin{cases} L(\alpha) = -\frac{1}{2}\alpha^T P \alpha + \alpha^T E \\ 0 \leq \alpha \leq C \\ \alpha^T y = 0 \end{cases} \quad (2.7)$$

Учитывая систему (2.5.9) легко находим выражения для P и подставляем в метод cvxopt.solvers.qp.

```
def product(self,k,l): #Аналог скалярного произведения двух векторов
    return np.exp(-sum((k-l)**2)/(2*self.sigma_sq))

def gaussian_kernel(self,x1,x2):
    m1=x2.shape[0]
    n1=x1.shape[0]
    op=[[self.product(x1[x_index],x2[l_index]) for l_index in
    ↪ range(m1)] for x_index in range(n1)]
    #Находит все комбинации скалярных произведений векторов-объектов
    return np.array(op)

def fit(self,x,t):
    n_samples, n_features = x.shape
    y=np.copy(t)
    X=np.copy(x)

    #Compute the kernel matrix using the RBF kernel. The kernel
    ↪ matrix K has shape (n_samples, n_samples)
    K=self.gaussian_kernel(X,X)

    P = cvxopt.matrix(np.outer(y,y) * K)
    q = cvxopt.matrix(np.ones(n_samples) * -1)
    A = cvxopt.matrix(y, (1,n_samples))
    b = cvxopt.matrix(0.0)
    # soft-margin SVM
    G = cvxopt.matrix(np.vstack((np.diag(np.ones(n_samples) * -1),
    ↪ np.identity(n_samples))))
```

```

h = cvxopt.matrix(np.hstack((np.zeros(n_samples),
    ↪ np.ones(n_samples) * self.C)))

# solve QP problem. The solution is a dictionary containing the
    ↪ optimal values of the Lagrange multipliers.
solution = cvxopt.solvers.qp(P, q, G, h, A, b)

#Extract the Lagrange multipliers
a = np.ravel(solution['x'])

# Compute the weight vector
self.W = ((y * a).T @ K)

#Select the indices of the support vectors by thresholding the
    ↪ Lagrange multipliers.
S = (a > 1e-4).flatten()

def predict(self,x_train):
    X=np.copy(x_train)
    init=np.copy(self.initial)
    xpr=self.gaussian_kernel(X,init)
    weight=np.copy(self.W)
    predictin = xpr.dot(weight)
    return np.where(predictin > 0, 1, -1)

```

Аccуpacy пpи C=1: 0.9979317476732161

Вpемя pаботы: 10 минут на выборке из 900 объектов.

Визуализация:

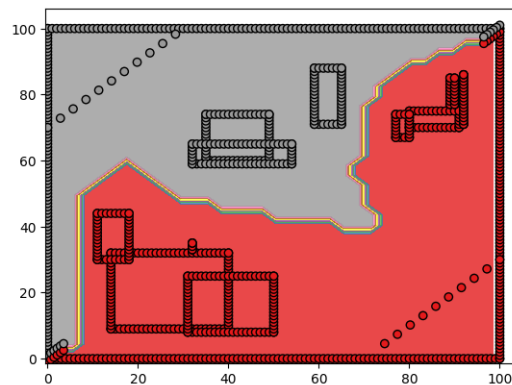


Рис. 5

Библиотека `svxopt` использует такой метод оптимизации как Interior Point Method (метод внутренней точки. Метод внутренней точки основан на следующих идеях: Вместо решения задачи оптимизации напрямую, мы решаем серию вспомогательных задач, которые приближаются к оригинальной задаче. В каждой вспомогательной задаче мы используем barrier-функцию, которая предотвращает выход из допустимой области. Barrier-функция выбирается так, чтобы она была гладкой и дважды дифференцируемой в допустимой области.

Barrier-функция имеет следующий вид:

$$B(x, \mu) = f(x) - \mu \cdot \sum_{i=1}^n [\ln(x_i - l_i) + \ln(u_i - x_i)]$$

где: $f(x)$ - функция цели x - вектор переменных $l_i u_i$ - нижняя и верхняя границы для переменной x_i μ - параметр barrier-функции

Вспомогательная задача имеет следующий вид:

minimize $B(x, \mu)$

subject to $g_i(x) \leq 0, i = 1, \dots, m$

$x \geq 0$

где: $g_i(x)$ - ограничения задачи m - количество ограничений

Алгоритм метода внутренней точки состоит из следующих шагов: Инициализация параметра μ и начального значения x . Решение вспомогательной задачи с помощью метода Ньютона или квази-Ньютона. Обновление параметра μ и значения x . Повтор шагов 2-3 до достижения оптимального решения. Подробнее данный алгоритм можно посмотреть в [4]

2.7 Реализация SVM с помощью SMO.

Используем алгоритм Sequential Minimal Optimization для решения задачи квадратичного программирования(). Данный алгоритм используется в `sklearn.svm.SVC`.

ПМО разбивает эту задачу на ряд наименьших возможных подзадач, которые затем решаются аналитически. Из-за линейного равенства в ограничениях, которое включает лагранжские множители α_i наименьшая возможная задача включает два таких множителя. Тогда для любых двух множителей α_1, α_2 .

$$0 \leq \alpha_1, \alpha_2 \leq C$$

$$y_1\alpha_1 + y_2\alpha_2 = k$$

и эту суженную задачу можно решать аналитически: нужно найти минимум одномерной квадратичной функции. k является суммой остальных членов в ограничении-уравнении с противоположным знаком, неизменной на каждой итерации.

Алгоритм действует следующим образом[5]: Найти лагранжей множитель α_1 , который нарушает условия Каруша – Куна – Такера (ККТ) для задачи оптимизации. Выбрать второй множитель α_2 и оптимизировать пару (α_1, α_2) Повторите шаги 1 и 2 до совпадения. Когда все лагранжевые множители удовлетворяют условиям ККТ (в пределах определенного пользователем допуска), задача решена. Хотя этот алгоритм и совпадает гарантированно, для выбора пар множителей применяется эвристика, чтобы ускорить темп совпадения. Это критически для больших наборов данных, поскольку существует $n(n - 1)$ возможных вариантов выбора α_i, α_j .

из ограничения $\sum_{i=1}^n (\alpha_i y_i) = 0$ получаем $y_1\alpha_1 + y_2\alpha_2 = -\sum_{i=3}^n (\alpha_i y_i) = k$

$$y_i = -1, 1$$

$0 \leq \alpha_i \leq C$ $\alpha_1\alpha_2$ α_2 может быть вычислен с помощью первой производной целевой функции, чтобы найти ее экстремум $\alpha_2^{new} = \alpha_2^{old} + y_2 \cdot \frac{E_2 - E_1}{\nu}$

$$E_i = y_i^- - y_i$$

$$\nu = K_{11} - 2K_{12} + K_{22}$$

$$K_{ij} = K(x_i, x_j)$$

Если $y_1 \neq y_2$:

$$L = \max(0, \alpha_2 - \alpha_1)$$

$$H = \min(C, C + \alpha_2 - \alpha_1)$$

Если $y_1 = y_2$:

$$L = \max(0, \alpha_2 + \alpha_1 - C)$$

$$H = \min(C, \alpha_2 + \alpha_1)$$

Тогда:

$$\alpha_2^{new} = \begin{cases} L, \alpha_2^{new} \leq L \\ \alpha_2^{new}, L \leq \alpha_2^{new} \leq H \\ H, H \leq \alpha_2^{new} \end{cases}$$

$$\alpha_1^{new} = \alpha_1^{old} + y_1 y_2 (\alpha_2^{old} - \alpha_2^{new})$$

```
def take_step(self, i1, i2):
    if (i1 == i2):
        return 0
    x1 = self.X[i1, :]
    x2 = self.X[i2, :]
    y1 = self.y[i1]
    y2 = self.y[i2]
    alpha1 = self.alphas[i1]
    alpha2 = self.alphas[i2]
    b = self.b
    E1 = self.get_error(i1)
    E2 = self.get_error(i2)
    s = y1 * y2
    if y1 != y2:
        L = max(0, alpha2 - alpha1)
        H = min(self.C, self.C + alpha2 - alpha1)
    else:
        L = max(0, alpha2 + alpha1 - self.C)
        H = min(self.C, alpha2 + alpha1)

    if L == H:
        return 0

    k11 = self.kernel_func(x1, x1)
    k12 = self.kernel_func(x1, x2)
    k22 = self.kernel_func(x2, x2)
    eta = k11 + k22 - 2 * k12
    if eta > 0:
        alpha2_new = alpha2 + y2 * (E1 - E2) / eta
        if alpha2_new >= H:
            alpha2_new = H
        elif alpha2_new <= L:
```

```

        alpha2_new = L
    else:
        # Abnormal case for eta <= 0, treat this scenario as no
        ↪ progress
        return 0
    # Numerical tolerance
    # if abs(alpha2_new - alpha2) < self.eps:    # this is slower
    # below is faster, not degrade the SVM performance
    if abs(alpha2_new - alpha2) < self.eps * (alpha2 +
        ↪ alpha2_new + self.eps):
        return 0
    alpha1_new = alpha1 + s * (alpha2 - alpha2_new)
    # Numerical tolerance
    if alpha1_new < self.eps:
        alpha1_new = 0
    elif alpha1_new > (self.C - self.eps):
        alpha1_new = self.C
    # Update threshold
    b1 = b - E1 - y1 * (alpha1_new - alpha1) * k11 - y2 *
        ↪ (alpha2_new - alpha2) * k12
    b2 = b - E2 - y1 * (alpha1_new - alpha1) * k12 - y2 *
        ↪ (alpha2_new - alpha2) * k22
    if 0 < alpha1_new < self.C:
        self.b = b1
    elif 0 < alpha2_new < self.C:
        self.b = b2
    else:
        self.b = 0.5 * (b1 + b2)
    # Update weight vector for linear SVM
    if self.is_linear_kernel:
        self.w = self.w + y1 * (alpha1_new - alpha1) * x1 \
            + y2 * (alpha2_new - alpha2) * x2
    self.alphas[i1] = alpha1_new
    self.alphas[i2] = alpha2_new
    # Error cache update
    ## if alpha1 & alpha2 are not at bounds, the error will be 0
    self.error[i1] = 0
    self.error[i2] = 0
    i_list = [idx for idx, alpha in enumerate(self.alphas) \
        if 0 < alpha and alpha < self.C]
    for i in i_list:
        self.error[i] += \

```

```

        y1 * (alpha1_new - alpha1) * self.kernel_func(x1,
        ↪ self.X[i,:]) \
    + y2 * (alpha2_new - alpha2) * self.kernel_func(x2,
        ↪ self.X[i,:]) \
    + (self.b - b)
    return 1

def examine_example(self, i2):
    y2 = self.y[i2]
    alpha2 = self.alphas[i2]
    E2 = self.get_error(i2)
    r2 = E2 * y2
    if ((r2 < -self.tol and alpha2 < self.C) or (r2 > self.tol and
    ↪ alpha2 > 0)):
        if len(self.alphas[(0 < self.alphas) & (self.alphas <
        ↪ self.C)]) > 1:
            if E2 > 0:
                i1 = np.argmin(self.error)
            else:
                i1 = np.argmax(self.error)
            if self.take_step(i1, i2):
                return 1
    # loop over all non-zero and non-C alpha, starting at a
    ↪ random point
    i1_list = [idx for idx, alpha in enumerate(self.alphas) \
                if 0 < alpha and alpha < self.C]
    i1_list = np.roll(i1_list,
    ↪ np.random.choice(np.arange(self.m)))
    for i1 in i1_list:
        if self.take_step(i1, i2):
            return 1
    # loop over all possible i1, starting at a random point
    i1_list = np.roll(np.arange(self.m),
    ↪ np.random.choice(np.arange(self.m)))
    for i1 in i1_list:
        if self.take_step(i1, i2):
            return 1
    return 0

def fit(self):
    loop_num = 0
    numChanged = 0
    examineAll = True

```

```

while numChanged > 0 or examineAll:
    if loop_num >= self.max_iter:
        break
    numChanged = 0
    if examineAll:
        for i2 in range(self.m):
            numChanged += self.examine_example(i2)
    else:
        i2_list = [idx for idx, alpha in enumerate(self.alphas)
        ↪ \
                    if 0 < alpha and alpha < self.C]
        for i2 in i2_list:
            numChanged += self.examine_example(i2)
    if examineAll:
        examineAll = False
    elif numChanged == 0:
        examineAll = True
    loop_num += 1

```

При $C = 1, kernel = 'rbf', max_iter = 10, tol = 1e - 1, eps = 1e - 1$
 Accuracy: 0.9921436588103255
 Время работы: 10 минут на выборке из 900 объектов.
 Визуализация:

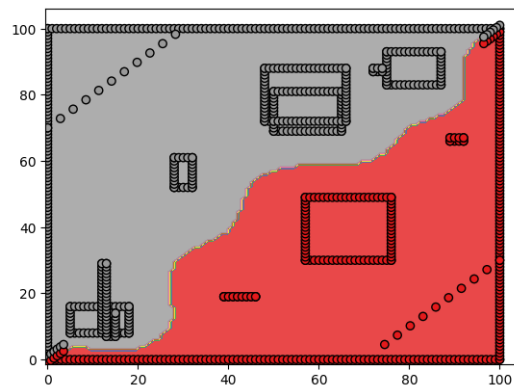


Рис. 6

2.8 Извлечение координат траектории и подсчет точек пути.

Алгоритм извлечения пути(рис. 7):

1) (x_0, y_0) - начальная точка. Задаем константу радиуса поиска R .

2)

$$x_{i+1} = x_i + R \cos(\phi)$$

$$y_{i+1} = y_i + R \sin(\phi)$$

$$0 \leq \phi \leq 2\pi$$

$(x_i - x_{i-1}, y_i - y_{i-1}) \cdot (x_{i+1} - x_i, y_{i+1} - y_i) \geq 0$ - путь не может резко повернуть более чем на 90 градусов. Ограничение на скалярное произведение необходимо для продвижения по траектории строго в одном направлении.

3) $\text{prob} = \text{model.predict}_{\text{proba}}([x_{i+1}, y_{i+1}])[0]$ Если точка лежит на разделяющей поверхности, $\text{prob} \approx 0.5$. Для различных ϕ ищем точку с prob максимально близким к 0.5 и сохраняем ее в массив.

Этот метод можно использовать как для получения координат траектории так и для сравнения длин траекторий(рис. 8).

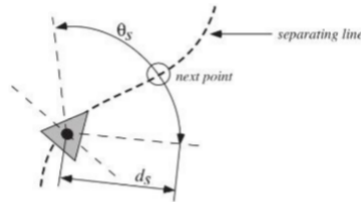


Fig. 3. Search for the next point on the separating surface.

Рис. 7

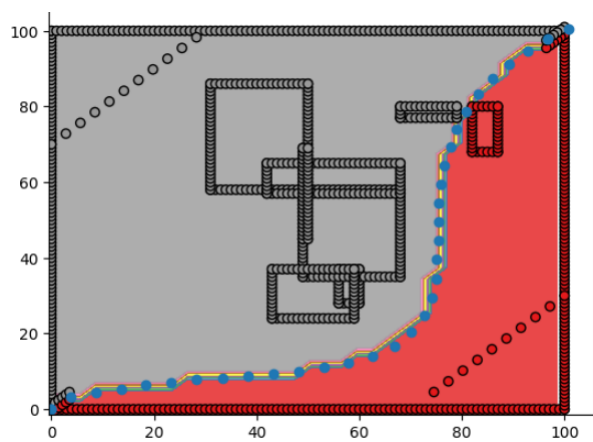


Рис. 8

3 Библиографические ссылки.

1. notebook:<https://colab.research.google.com/drive/1xfIpMxopuhnPYiKf56cVe8Jb0FnPwSO>
2. В.В.Вьюгин, Математические основы теории машинного обучения и прогнозирования - 2013;
3. К.В.Воронцов, Лекции по методу опорных векторов - 2007;
4. Jun Miura, Support Vector Path Planning - 2006;
5. Курс: Методы оптимизации в машинном обучении, 2012, Методы внутренней точки
6. <https://lucien-east.github.io/2022/07/30/Implement-SVM-with-SMO-from-scratch/>