Лекция 10
Машины опорных векторов

Николай Анохин

16 мая 2015 г.

План занятия

SVM

Функции ядра

SGD

Постановка задачи

Пусть дан набор объектов $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\},\ \mathbf{x}_i \in \mathcal{X},\ y_i \in \mathcal{Y},\ i \in 1, \dots, N$, полученный из неизвестной закономерности $y = f(\mathbf{x})$. Необходимо выбрать из семейства параметрических функций

$$H = \{h(\mathbf{x}, \theta) : \mathcal{X} \times \Theta \to \mathcal{Y}\}$$

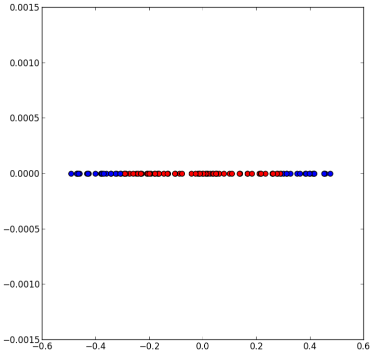
такую $h^*(\mathbf{x}) = h(\mathbf{x}, \theta^*)$, которая наиболее точно апроксимирует $f(\mathbf{x})$.

Задачи

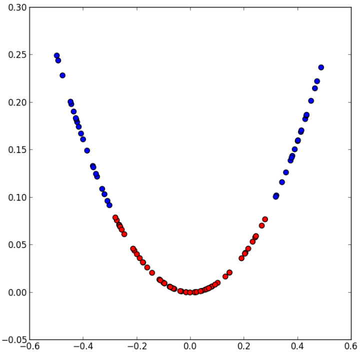
- Регрессия: $\mathcal{Y} = [a, b] \subset \mathbb{R}$
- Классификация: $|\mathcal{Y}| < C$

SVM

Мотивация



0.0015
0.0010
0.0005
0.0000
−0.0005
−0.0010
−0.0015
−0.6
−0.4
−0.2
0.0
0.2
0.4
0.6



0.30
0.25
0.20
0.15
0.10
0.05
0.00
−0.05
−0.6
−0.4
−0.2
0.0
0.2
0.4
0.6

Обобщенные линейные модели

Обучающая выборка

$$X = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$$

Значения целевой переменной

$$t_1, \dots, t_N; \quad t_j \in \{-1, +1\}$$

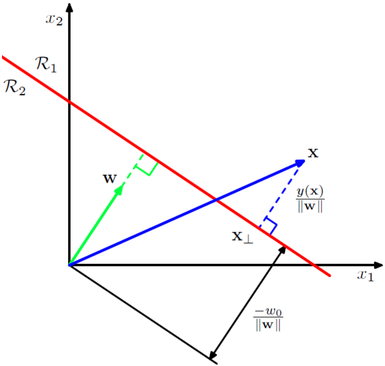
Функция принятия решения

$$y(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}) + b$$

Разделяющая плоскость (РП)

$$y_i(\mathbf{x_i})t_i > 0$$

Решений много: как выбрать?



Максимальный зазор

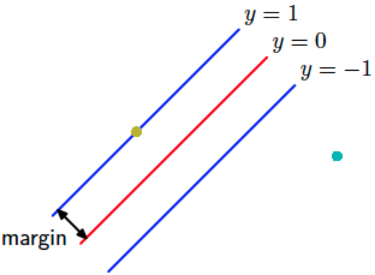
Margin – наименьшее расстояние между РП и обучающим объектом.

$$d_j = \frac{|y(\mathbf{x}_j)|}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{t_j y(\mathbf{x}_j)}{\|\mathbf{w}\|} =$$

$$= \frac{t_j(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_j) + b)}{\|\mathbf{w}\|}$$

Оптимальная РП

$$\arg\max_{\mathbf{w},b} \left[\frac{1}{\|\mathbf{w}\|} \min_j t_j(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_j) + b) \right]$$



Задача оптимизации

Расстояние от точки x_j до РП

$$d_j = \frac{t_j(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_j) + b)}{\|\mathbf{w}\|}$$

Для точки x_j, лежащей на минимальном расстоянии от РП положим

$$t_j(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_j) + b) = 1$$

Задача оптимизации

$$\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \to \min_{\mathbf{w}, b}$$

при условиях

$$t_j(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_j) + b) \geq 1, \quad \forall j \in 1, \ldots, N$$

Метод множителей Лагранжа $\mathbf{a} = (a_1, \ldots, a_N)^\top, \ a_i \geq 0$.

$$L(\mathbf{w}, b, \mathbf{a}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 - \sum_{j=1}^{N} a_j [t_j(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_j) + b) - 1]$$

Дифференцируем по $\mathbf{w}$ и b

$$\mathbf{w} = \sum_{j=1}^{N} a_j t_j \phi(\mathbf{x}_j), \ \ 0 = \sum_{j=1}^{N} a_j t_j$$

Подставляем $\mathbf{w}$ и b в лагранжиан

Сопряженная задача

Сопряженная задача

$$\tilde{L}(\mathbf{a}) = \sum_{j=1}^{N} a_j - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} a_i a_j t_i t_j \phi(\mathbf{x}_i)^\top \phi(\mathbf{x}_j) \to \max_{\mathbf{a}}$$

при условиях

$$a_j \geq 0, \quad \forall j \in 1, \dots, N$$

$$\sum_{j=1}^{N} a_j t_j = 0$$

Наблюдения

- $k(x_i, x_j) = \phi(\mathbf{x}_i)^\top \phi(\mathbf{x}_j)$ – неотрицательно-определенная функция
- лагранжиан $\tilde{L}(\mathbf{a})$ – выпуклая и ограниченная сверху функция

Классификация

Функция принятия решения

$$y(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}) + b = \sum_{j=1}^{N} a_j t_j \phi(\mathbf{x}_j)^\top \phi(\mathbf{x}) + b = \sum_{j=1}^{N} a_j t_j k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}) + b$$

Условия Karush-Kuhn-Tucker

$$\begin{array}{rcl} a_j & \geq & 0 \\ t_j y(\mathbf{x_j}) - 1 & \geq & 0 \\ a_j\{t_j y(\mathbf{x_j}) - 1\} & = & 0 \end{array}$$

Опорным векторам $\mathbf{x}_j \in S$ соответствуют $a_j > 0$

$$b = \frac{1}{N_s} \sum_{i \in S} \left(t_i - \sum_{j \in S} a_j t_j k(\mathbf{x_i}, \mathbf{x_j}) \right)$$

Линейно-разделимый случай

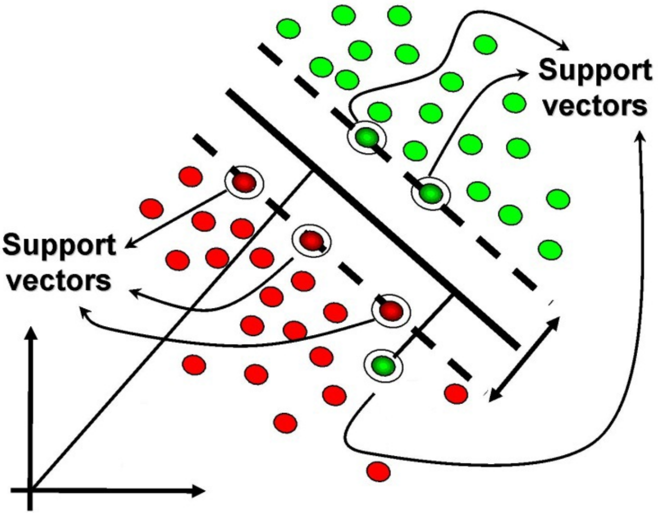
Задача

Дана обучающая выборка

	x_1	x_2	t
$\mathbf{x}_1$	1	-2	1
$\mathbf{x}_2$	1	2	-1

Найти оптимальную разделяющую плоскость, используя сопряженную задачу оптимизации

Линейно-неразделимый случай



Смягчение ограничений

Переменные $\xi_j \geq 0$ (slacks):

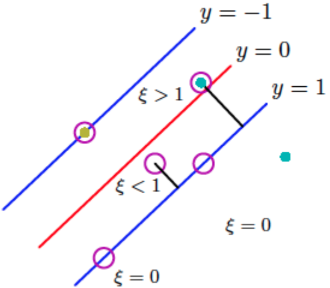
$$\xi_j = \begin{cases} 0, & \text{если } y(\mathbf{x_j})t_j \geq 1 \\ |t_j - y(\mathbf{x}_j)|, & \text{иначе} \end{cases}$$

Задача оптимизации

$$C \sum_{j=1}^{N} \xi_j + \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \to \min_{\mathbf{w},b}$$

при условиях

$$t_j y(\mathbf{x}_j) \geq 1 - \xi_j, \quad \xi_j \geq 0$$



Сопряженная задача

Сопряженная задача

$$\tilde{L}(\mathbf{a}) = \sum_{j=1}^{N} a_j - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} a_i a_j t_i t_j \phi(\mathbf{x}_i)^\top \phi(\mathbf{x}_j) \to \max_{\mathbf{a}}$$

при условиях

$$0 \leq a_j \leq C, \quad \forall j \in 1, \dots, N$$

$$\sum_{j=1}^{N} a_j t_j = 0$$

Наблюдения

- $a_j = 0$ – правильно проклассифицированные объекты
- $a_j = C$ – опорные векторы внутри отступа
- $0 < a_j < C$ – опорные векторы на границе

Классификация

Функция принятия решения

$$y(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N} a_j t_j k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}) + b$$

Константа b

$$b = \frac{1}{N_{\mathcal{M}}} \sum_{i \in \mathcal{M}} \left(t_i - \sum_{j \in S} a_j t_j k(\mathbf{x_i}, \mathbf{x_j}) \right)$$

Задача регрессии

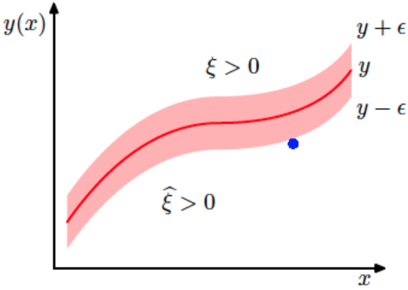
Переменные $\xi_j \geq 0$, $\hat{\xi}_j \geq 0$ (slacks):

$$t_j \leq y(\mathbf{x}_j) + \epsilon + \xi_n$$

$$t_j \geq y(\mathbf{x}_j) - \epsilon - \hat{\xi}_n$$

Задача оптимизации

$$C \sum_{j=1}^{N} (\hat{\xi}_j + \xi_j) + \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \to \min_{\mathbf{w}, b}$$



Численные методы оптимизации

- Chunking (Vapnik, 1982)
- Decomposition (Osuna, 1996)
- Sequential Minimal Optimization (Platt, 1999)

Функции ядра

Функции ядра

$\phi(\mathbf{x})$ – функция преобразования $\mathbf{x}$ из исходного пространства в спрямляющее пространство

Проблема: количество признаков может быть очень велико

Идея Kernel Trick

В процессе тренировки и применения SVM исходные векторы $\mathbf{x}$ используются только как аргументы в скалярном произведении $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i)^\top \phi(\mathbf{x_j})$. Но в этом случае можно избежать вычисления $\varphi(\mathbf{x})$!

Теорема Мерсера

Теорема

Функция $k(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ является ядром тогда и только тогда, когда она

- симметрична
$$k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = k(\mathbf{z}, \mathbf{x})$$
- неотрицательно определена
$$\int_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} \int_{\mathbf{z} \in \mathbf{X}} k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) g(\mathbf{x}) g(\mathbf{z}) d\mathbf{x} d\mathbf{z} \geqslant 0, \;\; \forall g(\mathbf{x}) : \mathbf{X} \to R$$

Задача

Пусть $\mathbf{x} \in R^2$, а преобразование $\phi(\mathbf{x})$

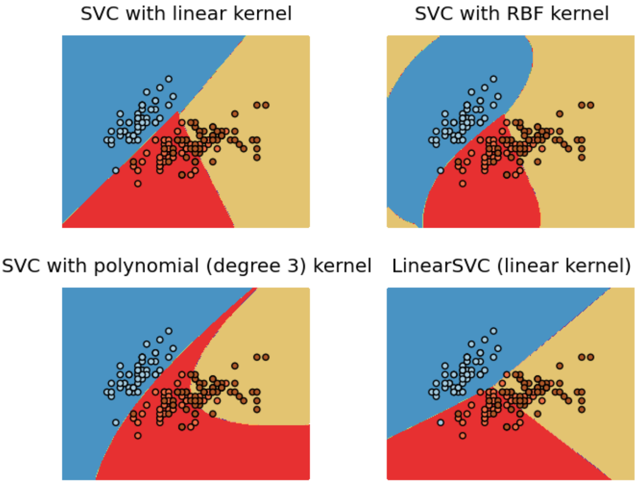
$$\phi(\mathbf{x}) = (1, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, x_2^2).$$

Проверить, что функция $k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = (1 + \mathbf{x}^\top \mathbf{z})^2$ является функцией ядра для данного преобразования.

Некоторые стандартные функции ядра

- Линейное ядро
$$k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \mathbf{x}^\top \mathbf{z}$$
- Полиномиальное ядро степени d
$$k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = (\mathbf{x}^\top \mathbf{z} + r)^d$$
- Radial Basis Function
$$k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = e^{-\gamma |\mathbf{x} - \mathbf{z}|^2}$$
- Sigmoid
$$k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \tanh(\gamma \mathbf{x}^\top \mathbf{z} + r)$$

Опять ирисы



SVC with linear kernel
SVC with RBF kernel
SVC with polynomial (degree 3) kernel
LinearSVC (linear kernel)

SGD

Связь с линейными моделями

Задача оптимизации

$$C\sum_{j=1}^{N}\xi_j + \frac{1}{2}\|w\|^2 \sim \sum_{j=1}^{N} E(y(\mathbf{x}_j), t_j) + \lambda\|w\|^2 \to \min_{\mathbf{w}, b}$$

Hinge loss

$$E(y_j, t_j) = \begin{cases} 1 - y_j t_j, & \text{если } y_j t_j < 1 \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$$

Stochastic Gradient Descent

Градиентный спуск

$$\mathbf{w}_{k+1} = \mathbf{w}_k - \eta(k)\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\nabla_{\mathbf{w}} l(\mathbf{x_n}, \mathbf{w}, t_n)$$

Стохастический градиентный спуск

$$\mathbf{w}_{k+1} = \mathbf{w}_k - \eta(k)\nabla_{\mathbf{w}} l(\mathbf{x_k}, \mathbf{w}, t_k)$$

Усредненный стохастический градиентный спуск $\bar{\mathbf{w}}_k = \frac{1}{k}\sum_{j=1}^{k}\mathbf{w}_j$

$$\mathbf{w}_{k+1} = \mathbf{w}_k - \eta(k)\nabla_{\mathbf{w}} l(\mathbf{x_k}, \mathbf{w}, t_k), \quad \bar{\mathbf{w}}_{k+1} = \frac{k}{k+1}\bar{\mathbf{w}}_k + \frac{1}{k+1}\mathbf{w}_{k+1}$$

Сходимость: $\sum_k \eta_k^2 < \infty, \;\; \sum_k \eta_k = \infty$

SGD tips

- Использовать SGD, когда обучение модели занимает слишком много времени
- Перемешать тренировочную выборку
- Следить за training error и **validation error**
- Поверять, правильно ли вычисляется градиент

$$Q(z, w + \delta) \approx Q(z, w) + \delta g$$

- Подобрать η_0 на небольшой выборке

$$\eta_k = \eta_0 (1 + \eta_0 \lambda k)^{-1}, \quad \lambda \text{ – параметр регуляризации}$$

SVM – итоги

- \+ Нелинейная разделяющая поверхность
- \+ Глобальая оптимизация
- \+ Разреженное решение
- \+ Хорошая обобщающая способность
- \- Не поддерживает $p(C_k|\mathbf{x})$
- \- Чувствительность к выбросам
- \- Нет алгоритма выбора ядра
- \- Медленное обучение

Вопросы