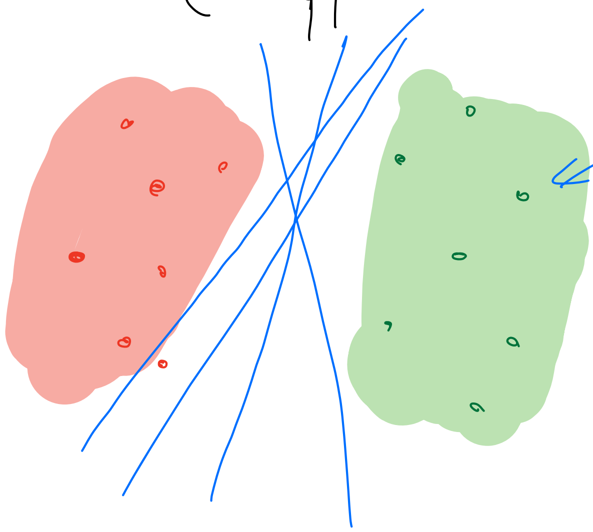
Метод опорных векторов
(Support Vector Machine) SVM



$\{x_i, y_i\}_{i=1}^{n}$

$x_i \in \mathbb{R}^d$ $y_i \in \{-1; 1\}$

Хотим: гиперплоскость $\langle w^*; x\rangle + b^* = 0$, которая разделяет два класса

$\langle w^*; x\rangle + b^*$ в зав. от того, где x меняет знак

$$y(\langle w^*; x\rangle + b^*) > 0$$

$\forall x \in$ обуч. выборки (в идеале для всей „природы")

<u>Идея метода SVM</u> – построить гиперплоскость так, чтобы расстояние от гиперплоскости до ближ. объекта $+1$ и -1 было максимальным

Расстояние до гиперпл.: ($\langle w, x\rangle + b = 0$)

$$\rho(x) = \frac{|\langle w, x\rangle + b|}{\|w\|_2}$$

<u>Формальная постановка:</u>

$$\min_{i \text{ от } 1 \text{ до } n} |\langle w; x_i\rangle + b| \to \max_{w, b}$$

s.t. $y_i(\langle w, x_i \rangle + b) > 0 \quad i$ от 1 до n

ограничения

$\|w\|_2 = 1$

Переформулируем:

Введем $C = \min\limits_{i \text{ от } 1 \text{ до } n} |\langle w, x \rangle + b|$, $\hat{w} = \frac{w}{C}$, $\hat{b} = \frac{b}{C}$

тогда $y_i(\langle \hat{w}; x_i \rangle + \hat{b}) = y_i\left(\frac{1}{C}\langle w, x_i \rangle + \frac{b}{C}\right)$

$= \frac{1}{C} \cdot y_i(\langle w, x_i \rangle + b)$

$= \dfrac{y_i(\langle w, x_i \rangle + b)}{\min\limits_{j \text{ от } 1 \text{ до } n} |\langle w, x_j \rangle + b|} = \dfrac{|\langle w; x_i \rangle + b|}{\min\limits_j |\langle w; x_j \rangle + b|} \geq 1$

$\|w\|_2 = 1 = \|\hat{w}\|_2 \cdot C \qquad C = \frac{1}{\|\hat{w}\|_2}$

$\frac{1}{\|\hat{w}\|_2} \to \max\limits_{\hat{w}, \hat{b}} \quad \left(\|\hat{w}\|_2 \to \min\limits_{\hat{w}, \hat{b}} \right)$

s.t. $y_i(\langle \hat{w}; x_i \rangle + \hat{b}) \geq 1 \quad i$ от 1 до n

задача SVM

$$\boxed{\begin{array}{l} \min\limits_{\hat{w}, \hat{b}} \|\hat{w}\|_2^2 \\ \text{s.t. } y_i(\langle \hat{w}, x_i \rangle + \hat{b}) \geq 1 \quad i \text{ от } 1 \text{ до } n \end{array}}$$

Решающее правило: $\text{sign}(\langle \hat{w}^*, x \rangle + \hat{b}^*)$

NB $\hat{\omega}, \hat{b} \to \omega, b$

Функция Лагранжа: ($g_i(w, b) \le 0$ для Лагранжиана)

$$L(\omega, b, \mu) = \|\omega\|_2^2 + \sum_{i=1}^{n} \mu_i \left(1 - y_i(\langle \omega, x_i \rangle + b)\right)$$

NB можно оптимизировать L

$$\min_{\omega, b} \max_{\mu \ge 0} L(\omega, b, \mu)$$

Условия ККТ:

1) $\dfrac{\partial L}{\partial \omega} = 0$ $\quad$ $\dfrac{\partial L}{\partial b} = 0$

$2\omega - \sum_{i=1}^{n} \mu_i y_i x_i = 0$

$\sum_{i=1}^{n} \mu_i y_i = 0$

2) $y_i(\langle \omega, x_i \rangle + b) \ge 1$

3) $\mu_i \ge 0$

4) $\mu_i \left(1 - y_i(\langle \omega, x_i \rangle + b)\right) = 0$

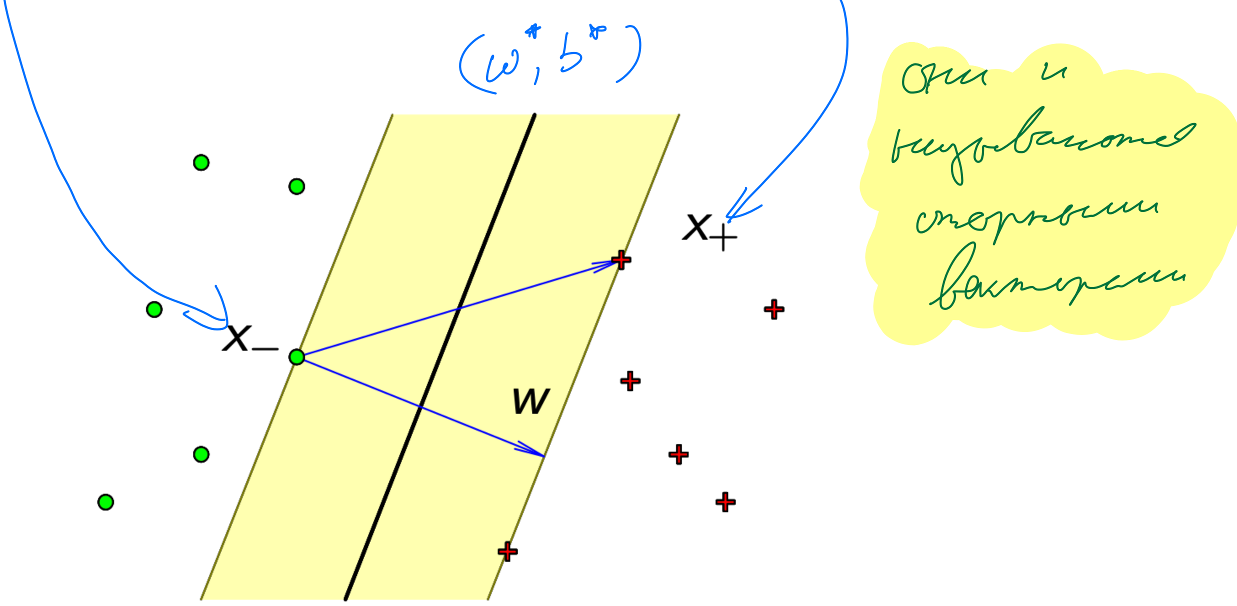
Выводы:

- $\omega = \frac{1}{2} \sum \mu_i y_i x_i$ $\quad$ ω комбинация $y_i x_i$ где $\mu_i \ne 0$
- μ_j может $\ne 0$, только в случае

$$1 = |\langle \omega; x_j \rangle + b|$$

x_j – является элемент, на котором достигается минимум

на этих x_j достигается минимум



Выборка не разделима

Мягкие отступы

нужно подбирать

$$\min_{w,b,\xi} \|w\|_2^2 + C\sum_{i=1}^{n} \xi_i$$

разрешаем нарушить

$$\text{s.t.} \quad y_i(\langle w, x_i\rangle + b) \geqslant 1 - \xi_i$$

$$\xi_i \geqslant 0$$

Эквивалентно:

$$\min_{w,b} \|w\|_2^2 + C\sum_{i=1}^{n} \big(1 - y_i(\langle w, x_i\rangle + b)\big)_+$$

$q_+ = \max\{0; q\}$

регуляризатор

минимизируем эмп. риска

$L(\hat{y}, y') = \max\{0;\ 1 - y'\hat{y}\}$

hinge loss

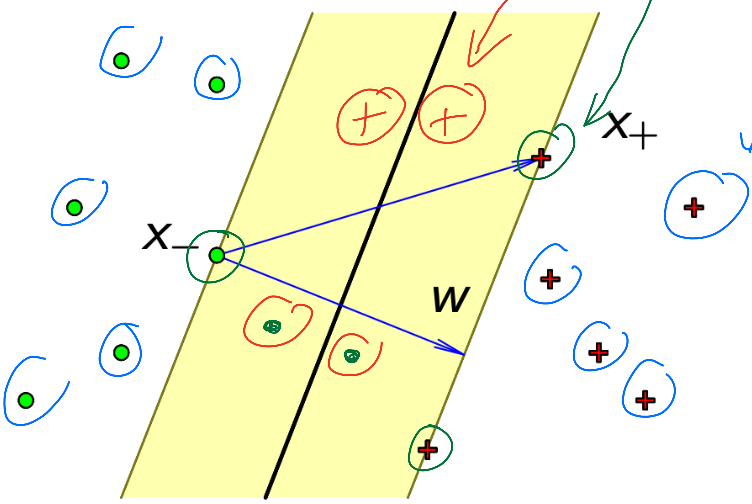
NB для такой постановки PEGASOS (aka GD по след.)

KKT:

1) $y_i(\langle w^*, x_i\rangle + b^*) > 1$ — тогда вектор перифер.

2) $y_i(\langle w^*, x_i\rangle + b^*) = 1$ — тогда вектор опорный

3) $y_i(\langle w^*, x_i\rangle + b^*) < 1$ — опорный нарушитель



Идея: $x_i \xrightarrow{\varphi} x_i,\ x_i^2,\ x_i^3$ (раздуваем признак. пр-во)

SVM:

$$\min_{w,b,\xi} \|w\|_2^2 + C\sum_{i=1}^{n} \xi_i$$

$$\text{s.t. } y_i(\langle w, \varphi(x_i)\rangle + b) \geq 1 - \xi_i$$

$$\xi_i \geq 0$$

NB так можно не только для SVM

Замечание:

$$\min_{\omega, b} \underbrace{\|\omega\|_2^2 + C \sum_{i=1}^{n} \left(1 - y_i (\langle \omega, \varphi(x_i) \rangle + b)\right)_+}_{G(\omega, b)}$$

Лемма $\quad \omega^* = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \varphi(x_i)$ — решение

разреженное (много $\alpha_i = 0$) только для опорных векторов нет

Док-во:

Пусть ω^* — решение, тогда

$$\omega^* = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \varphi(x_i) + \Delta\omega \qquad \Delta\omega \neq 0$$

$$\langle \Delta\omega ; \varphi(x_i) \rangle = 0$$

$$\hat{\omega}^* = \omega^* - \Delta\omega$$

$$\|\omega^*\|_2^2 = \|\hat{\omega}^*\|_2^2 + \underbrace{2\langle \Delta\omega ; \hat{\omega}^* \rangle}_{0} + \|\Delta\omega\|_2^2$$

$$\|\omega^*\|_2^2 \geq \|\hat{\omega}^*\|_2^2$$

$$\|\hat{\omega}^*\|_2^2 + C \sum_{i=1}^{n} \left(1 - y_i (\langle \hat{\omega}^*, \varphi(x_i) \rangle + b)\right)_+$$

$\hat{\omega}^* = \omega^* - \Delta\omega$

то $\leq \|\omega^*\|_2^2 + C \sum_{i=1}^{n} \left(1 - y_i \langle \omega^* ; \varphi(x_i) \rangle + b\right)_+$

$$G(\hat{\omega}^*, b^*) \leq G(\omega^*, b^*)$$

ω^* — решение, то $\hat{\omega}^*$ — решение ■

Решающее правило:

$$\operatorname{sign}\left(\langle w^*; \varphi(x)\rangle + b^*\right)$$

$$= \operatorname{sign}\left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \underbrace{\langle \varphi(x_i); \varphi(x)\rangle}_{\text{нужно считать только}} + b^*\right)$$

можно искать α_i и не использовать φ_i напрямую

нужно $\langle \varphi(x); \varphi(x')\rangle = K(x, x')$

ядро

Пример:

0) $K(x, x') = \langle x, x'\rangle^2 \qquad x, x' \in \mathbb{R}^2$

$$= \left\langle \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \end{pmatrix} \right\rangle^2 =$$

$$= (x_1 x_1' + x_2 x_2')^2 = x_1^2 x_1'^2 + x_2^2 x_2'^2 + 2 x_1 x_1' x_2 x_2'$$

$$= \left\langle \begin{pmatrix} x_1^2 \\ x_2^2 \\ \sqrt{2}\, x_1 x_2 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} x_1'^2 \\ x_2' \\ \sqrt{2}\, x_1' x_2' \end{pmatrix} \right\rangle$$

$\in \mathbb{R}^3$

1) $K(x, x') = \langle x, x'\rangle \qquad x \in \mathbb{R}^d$

$$\dim \text{нового} = \frac{d(d+1)}{2}$$

2) $K(x,x') = \langle x, x' \rangle^p$ будут полиномы p степени

dim нового C^p_{d+p-1}

3) $K(x,x') = (1+\langle x, x' \rangle)^p$ — poly

4) $K(x,x') = \exp(-\gamma \|x-x'\|_2^2)$ — RBF

Не все ф. $K(x,x')$ — ядра

<u>Теорема</u> (Мерсера)

$K(x,x')$ - ядро $\iff$ $K(x,x')$ - неотриц. опред.

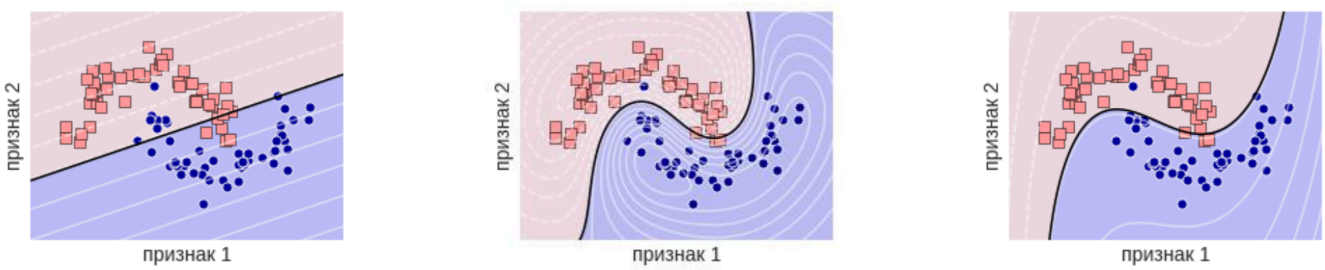
<u>Св-ва:</u>

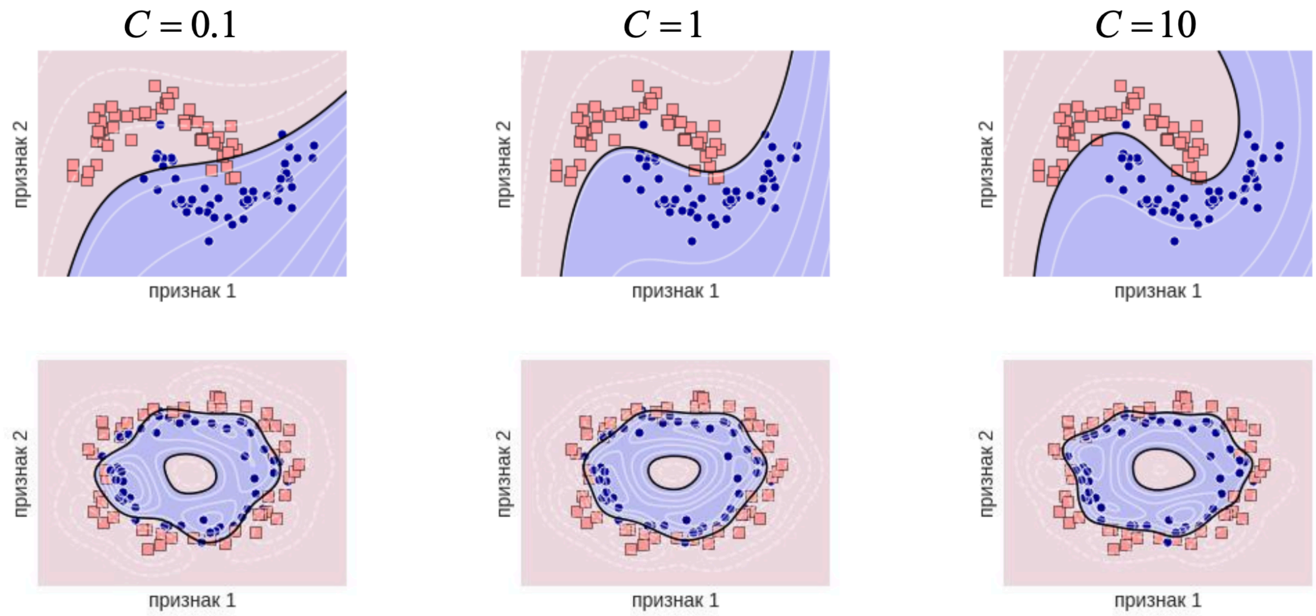
1). 1 - ядро $=$ ядро

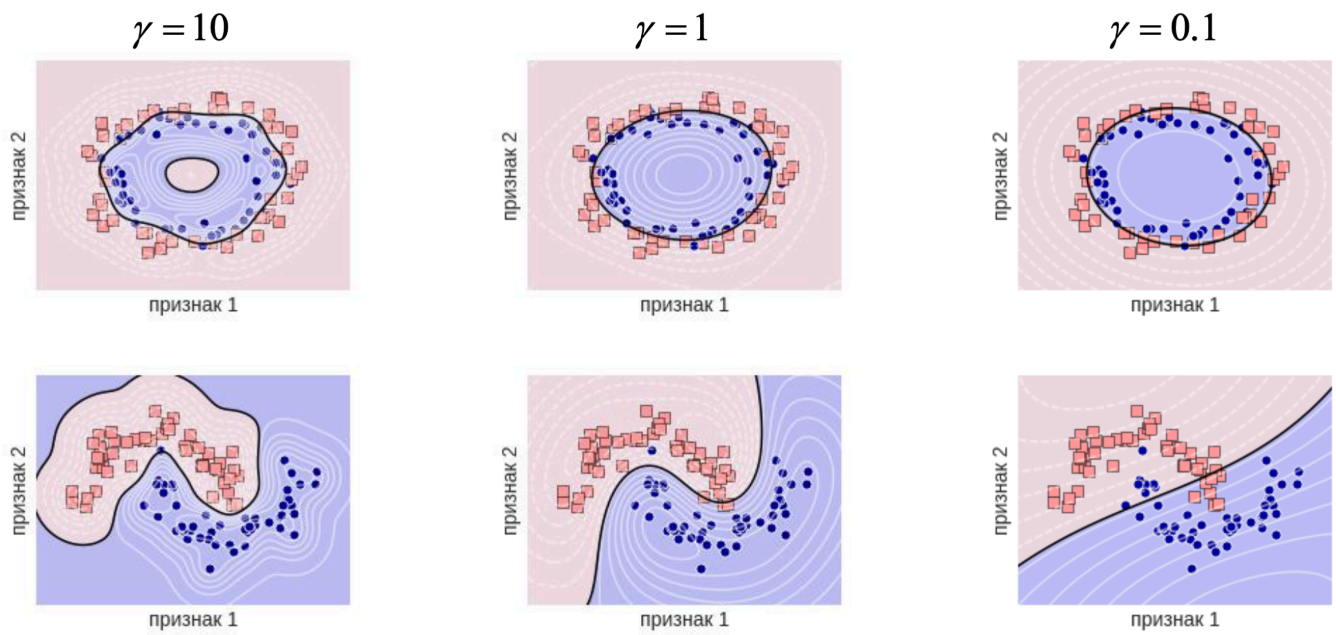
2). ядро · ядро $=$ ядро

3). ядро $+$ ядро $=$ ядро

4). $\underset{>0}{\alpha}$ ядро $=$ ядро




$C = 0.1$
$C = 1$
$C = 10$
признак 1
признак 2


$\gamma = 10$
$\gamma = 1$
$\gamma = 0.1$
признак 1
признак 2