Введение в искусственный интеллект. Машинное обучение

Тема семинара: пример расчетов для SVM

Бабин Д.Н., Иванов И.Е.

кафедра Математической Теории Интеллектуальных Систем

План семинара

1. Постановка задачи

План семинара

1. Постановка задачи
2. Выбор нелинейного ядра

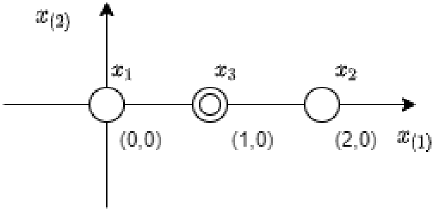
План семинара

1. Постановка задачи
2. Выбор нелинейного ядра
3. Необходимые расчеты

Постановка задачи

Задача

Методом опорных векторов разделить классы $A = \{x_1, x_2\}$ и $B = \{x_3\}$, если $x_1 = (0,0), x_2 = (2,0), x_3 = (1,0)$. Полагаем, что $y_1 = y_2 = +1, y_3 = -1$.



Выбор подходящего ядра

Указание [доказать]

Любые $m+1$ точек из $\mathbb{R}^n$ могут быть линейно разделены на любые два класса после перехода в новое пространство с помощью мономиального отображения степени не больше m (и соответственно ядра $K(x_1, x_2) = (\langle x_1, x_2 \rangle + 1)^m$).

Выбор подходящего ядра

Указание [доказать]

Любые $m+1$ точек из $\mathbb{R}^n$ могут быть линейно разделены на любые два класса после перехода в новое пространство с помощью мономиального отображения степени не больше m (и соответственно ядра $K(x_1, x_2) = (\langle x_1, x_2\rangle + 1)^m$).

Поэтому отображение ищем в виде
$\varphi : X \to Y, Y = \mathbb{R}^k, z \in Y, z_{(i)} = x_{(1)}^{i_1} x_{(2)}^{i_2} \dots x_{(n)}^{i_n} |_{i_1+i_2+\dots+i_n \le m}, 1 \le i \le k$ для
$X = \mathbb{R}^n, n = 2, m = 2.$

Выбор подходящего ядра

Указание [доказать]

Любые $m+1$ точек из $\mathbb{R}^n$ могут быть линейно разделены на любые два класса после перехода в новое пространство с помощью мономиального отображения степени не больше m (и соответственно ядра $K(x_1, x_2) = (\langle x_1, x_2 \rangle + 1)^m$).

Поэтому отображение ищем в виде
$\varphi : X \to Y, Y = \mathbb{R}^k, z \in Y, z_{(i)} = x_{(1)}^{i_1} x_{(2)}^{i_2} \dots x_{(n)}^{i_n}|_{i_1+i_2+\dots+i_n \le m}, 1 \le i \le k$ для
$X = \mathbb{R}^n, n = 2, m = 2.$
Ядро, соответствующее этому отображению: $K(x_1, x_2) = (\langle x_1, x_2 \rangle + 1)^2$.

Выбор подходящего ядра

Указание [доказать]

Любые $m+1$ точек из $\mathbb{R}^n$ могут быть линейно разделены на любые два класса после перехода в новое пространство с помощью мономиального отображения степени не больше m (и соответственно ядра $K(x_1, x_2) = (\langle x_1, x_2\rangle + 1)^m$).

Поэтому отображение ищем в виде
$\varphi : X \to Y, Y = \mathbb{R}^k, z \in Y, z_{(i)} = x_{(1)}^{i_1} x_{(2)}^{i_2} \dots x_{(n)}^{i_n}|_{i_1+i_2+\dots+i_n \le m}, 1 \le i \le k$ для
$X = \mathbb{R}^n, n = 2, m = 2.$
Ядро, соответствующее этому отображению: $K(x_1, x_2) = (\langle x_1, x_2\rangle + 1)^2$.
Будем решать задачу

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

Выбор подходящего ядра

Указание [доказать]

Любые $m+1$ точек из $\mathbb{R}^n$ могут быть линейно разделены на любые два класса после перехода в новое пространство с помощью мономиального отображения степени не больше m (и соответственно ядра $K(x_1, x_2) = (\langle x_1, x_2\rangle + 1)^m$).

Поэтому отображение ищем в виде
$\varphi : X \to Y, Y = \mathbb{R}^k, z \in Y, z_{(i)} = x_{(1)}^{i_1} x_{(2)}^{i_2} \dots x_{(n)}^{i_n}|_{i_1+i_2+\dots+i_n \le m}, 1 \le i \le k$ для
$X = \mathbb{R}^n, n = 2, m = 2.$
Ядро, соответствующее этому отображению: $K(x_1, x_2) = (\langle x_1, x_2\rangle + 1)^2$.
Будем решать задачу

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

Упражнение. Чему равна размерность k для мономиального $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^k$?

Необходимые расчеты 1

$$-Q(\lambda) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\lambda_i\lambda_j y_i y_j(\langle x_i, x_j\rangle + 1)^2 - \sum_{i=1}^{3}\lambda_i =$$
$$\frac{1}{2}(2\lambda_1\lambda_2 - 2\lambda_1\lambda_3 + \lambda_1^2 - 18\lambda_2\lambda_3 + 25\lambda_2^2 + 4\lambda_3^2) - (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3).$$

Необходимые расчеты 1

$-Q(\lambda) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\lambda_i\lambda_j y_i y_j(\langle x_i, x_j\rangle + 1)^2 - \sum_{i=1}^{3}\lambda_i =$
$\frac{1}{2}(2\lambda_1\lambda_2 - 2\lambda_1\lambda_3 + \lambda_1^2 - 18\lambda_2\lambda_3 + 25\lambda_2^2 + 4\lambda_3^2) - (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3).$
Из условия $\sum_{i=1}^{3}\lambda_i y_i = 0$ имеем $\lambda_3 = \lambda_1 + \lambda_2$.

Необходимые расчеты 1

$-Q(\lambda) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\lambda_i\lambda_j y_i y_j(\langle x_i, x_j\rangle + 1)^2 - \sum_{i=1}^{3}\lambda_i =$
$\frac{1}{2}(2\lambda_1\lambda_2 - 2\lambda_1\lambda_3 + \lambda_1^2 - 18\lambda_2\lambda_3 + 25\lambda_2^2 + 4\lambda_3^2) - (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3).$
Из условия $\sum_{i=1}^{3}\lambda_i y_i = 0$ имеем $\lambda_3 = \lambda_1 + \lambda_2$.
Подставим в выражение для $-Q(\lambda) = \frac{1}{2}(3\lambda_1^2 + 11\lambda_2^2 - 10\lambda_1\lambda_2) - 2(\lambda_1 + \lambda_2)$.

Необходимые расчеты 1

$-Q(\lambda) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\lambda_i\lambda_j y_i y_j(\langle x_i, x_j\rangle + 1)^2 - \sum_{i=1}^{3}\lambda_i =$
$\frac{1}{2}(2\lambda_1\lambda_2 - 2\lambda_1\lambda_3 + \lambda_1^2 - 18\lambda_2\lambda_3 + 25\lambda_2^2 + 4\lambda_3^2) - (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3).$
Из условия $\sum_{i=1}^{3}\lambda_i y_i = 0$ имеем $\lambda_3 = \lambda_1 + \lambda_2$.
Подставим в выражение для $-Q(\lambda) = \frac{1}{2}(3\lambda_1^2 + 11\lambda_2^2 - 10\lambda_1\lambda_2) - 2(\lambda_1 + \lambda_2)$.
Дифференцируем Q по λ:

$$\begin{cases} \frac{\partial Q}{\partial \lambda_1} = 0 & \Leftrightarrow 3\lambda_1 - 5\lambda_2 = 2, \\ \frac{\partial Q}{\partial \lambda_2} = 0 & \Leftrightarrow -5\lambda_1 + 11\lambda_2 = 2 \end{cases}$$

Необходимые расчеты 1

$-Q(\lambda) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\lambda_i\lambda_j y_i y_j(\langle x_i, x_j\rangle + 1)^2 - \sum_{i=1}^{3}\lambda_i =$
$\frac{1}{2}(2\lambda_1\lambda_2 - 2\lambda_1\lambda_3 + \lambda_1^2 - 18\lambda_2\lambda_3 + 25\lambda_2^2 + 4\lambda_3^2) - (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)$.
Из условия $\sum_{i=1}^{3}\lambda_i y_i = 0$ имеем $\lambda_3 = \lambda_1 + \lambda_2$.
Подставим в выражение для $-Q(\lambda) = \frac{1}{2}(3\lambda_1^2 + 11\lambda_2^2 - 10\lambda_1\lambda_2) - 2(\lambda_1 + \lambda_2)$.
Дифференцируем Q по λ:

$$\begin{cases} \frac{\partial Q}{\partial \lambda_1} = 0 \quad \Leftrightarrow 3\lambda_1 - 5\lambda_2 = 2, \\ \frac{\partial Q}{\partial \lambda_2} = 0 \quad \Leftrightarrow -5\lambda_1 + 11\lambda_2 = 2 \end{cases}$$

Решая линейную систему уравнений, получаем $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = (4, 2, 6)$.

Необходимые расчеты 2

Найдем разделяющую поверхность в виде:
$f(x) = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x) - w_0,\ w_0 = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x_j) - y_j, x = (x_{(1)}, x_{(2)})$.

Необходимые расчеты 2

Найдем разделяющую поверхность в виде:
$f(x) = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x) - w_0$, $w_0 = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x_j) - y_j, x = (x_{(1)}, x_{(2)})$.
Поскольку все $\lambda > 0$, то можем взять в качестве опорного вектора x_1.

Необходимые расчеты 2

Найдем разделяющую поверхность в виде:
$f(x) = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x) - w_0,\ w_0 = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x_j) - y_j, x = (x_{(1)}, x_{(2)})$.
Поскольку все $\lambda > 0$, то можем взять в качестве опорного вектора x_1.
Получим $w_0 = 4K(x_1, x_1) + 2K(x_2, x_1) - 6K(x_3, x_1) - 1 = -1$.

Необходимые расчеты 2

Найдем разделяющую поверхность в виде:
$f(x) = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x) - w_0$, $w_0 = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x_j) - y_j, x = (x_{(1)}, x_{(2)})$.
Поскольку все $\lambda > 0$, то можем взять в качестве опорного вектора x_1.
Получим $w_0 = 4K(x_1, x_1) + 2K(x_2, x_1) - 6K(x_3, x_1) - 1 = -1$.
Теперь рассчитаем основную часть: $\sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x) = 4 \cdot 1 + 2(2x_{(1)} + 1)^2 - 6(x_{(1)} + 1)^2$.

Найдем разделяющую поверхность в виде:
$f(x) = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x) - w_0$, $w_0 = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x_j) - y_j, x = (x_{(1)}, x_{(2)})$.
Поскольку все $\lambda > 0$, то можем взять в качестве опорного вектора x_1.
Получим $w_0 = 4K(x_1, x_1) + 2K(x_2, x_1) - 6K(x_3, x_1) - 1 = -1$.
Теперь рассчитаем основную часть: $\sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x) = 4 \cdot 1 + 2(2x_{(1)} + 1)^2 - 6(x_{(1)} + 1)^2$.
Объединяя, получаем **разделяющую поверхность**: $f(x) = 2x_{(1)}^2 - 4x_{(1)} + 1$.

Необходимые расчеты 2

Найдем разделяющую поверхность в виде:
$f(x) = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x) - w_0$, $w_0 = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x_j) - y_j, x = (x_{(1)}, x_{(2)})$.
Поскольку все $\lambda > 0$, то можем взять в качестве опорного вектора x_1.
Получим $w_0 = 4K(x_1, x_1) + 2K(x_2, x_1) - 6K(x_3, x_1) - 1 = -1$.
Теперь рассчитаем основную часть: $\sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x) = 4 \cdot 1 + 2(2x_{(1)} + 1)^2 - 6(x_{(1)} + 1)^2$.
Объединяя, получаем **разделяющую поверхность**: $f(x) = 2x_{(1)}^2 - 4x_{(1)} + 1$.

Нули разделителя: $f(x) = 0 \Leftrightarrow x_{(1)} = 1 \pm \frac{\sqrt{2}}{2}$.

Необходимые расчеты 2

Найдем разделяющую поверхность в виде:
$f(x) = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x) - w_0,\ w_0 = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x_j) - y_j, x = (x_{(1)}, x_{(2)})$.
Поскольку все $\lambda > 0$, то можем взять в качестве опорного вектора x_1.
Получим $w_0 = 4K(x_1, x_1) + 2K(x_2, x_1) - 6K(x_3, x_1) - 1 = -1$.
Теперь рассчитаем основную часть: $\sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x) = 4 \cdot 1 + 2(2x_{(1)} + 1)^2 - 6(x_{(1)} + 1)^2$.
Объединяя, получаем **разделяющую поверхность**: $f(x) = 2x_{(1)}^2 - 4x_{(1)} + 1$.

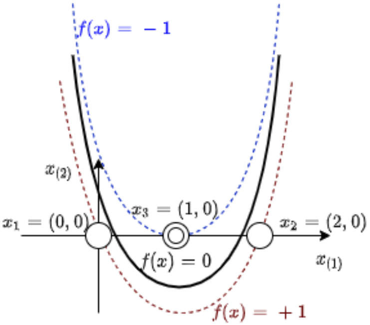
Нули разделителя: $f(x) = 0 \Leftrightarrow x_{(1)} = 1 \pm \frac{\sqrt{2}}{2}$.
Первый край полосы $(f(x) = -1)$:
$f_1(x) = f(x) + 1 = 2(x_{(1)} - 1)^2$.
Нули: $x_{(1)} = 1$ (это — исходная точка x_3).

Необходимые расчеты 2

Найдем разделяющую поверхность в виде:
$f(x) = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x) - w_0, \; w_0 = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x_j) - y_j, x = (x_{(1)}, x_{(2)})$.
Поскольку все $\lambda > 0$, то можем взять в качестве опорного вектора x_1.
Получим $w_0 = 4K(x_1, x_1) + 2K(x_2, x_1) - 6K(x_3, x_1) - 1 = -1$.
Теперь рассчитаем основную часть: $\sum_{i=1}^{3} \lambda_i y_i K(x_i, x) = 4 \cdot 1 + 2(2x_{(1)} + 1)^2 - 6(x_{(1)} + 1)^2$.
Объединяя, получаем **разделяющую поверхность**: $f(x) = 2x_{(1)}^2 - 4x_{(1)} + 1$.

Нули разделителя: $f(x) = 0 \Leftrightarrow x_{(1)} = 1 \pm \frac{\sqrt{2}}{2}$.
Первый край полосы $(f(x) = -1)$:
$f_1(x) = f(x) + 1 = 2(x_{(1)} - 1)^2$.
Нули: $x_{(1)} = 1$ (это — исходная точка x_3).
Второй край полосы $(f(x) = +1)$:
$f_2(x) = f(x) - 1 = 2x_{(1)}(x_{(1)} - 2)$.
Нули: $x_{(1)} = 0, x_{(1)} = 2$ (это — исходные точки x_1, x_2).

Построим визуализацию на плоскости как разделяющей поверхности, так и двух краев полосы:



Время для вопросов

Источники

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