Задача к собеседованию на ИППИ

задача предложена ***Бурнаевым Е.В.***

23 апреля 2018

Задача

Задача классификации заключается в том, что по выборке данных
$$\{(\mathbf{x}_i, y_i = y(\mathbf{x}_i))\}_{i=1}^{n}, \;\; \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d, \;\; y_i \in \{-1, 1\}$$
необходимо построить модель зависимости $\hat{y}(\mathbf{x})$ такую, что $\hat{y}(\mathbf{x}) \in \{-1, 1\}$ и для большинства значений $\mathbf{x}$ прогноз метки класса $\hat{y}(\mathbf{x})$ совпадает с настоящей меткой класса $y(\mathbf{x})$.

Рассматривается модель линейной разделяющей гиперплоскости
$$\hat{y}(\mathbf{x}) = sign(\mathbf{x}_i^T \mathbf{w} + w_0 > 0)$$

Для оценки вектора параметров $\mathbf{w}$, w_0 максимизируется отступ разделяющей гиперплоскости от объектов обучающей выборки:

$$\max_{\mathbf{w}, w_0, ||\mathbf{w}||=1} M,$$
$$s.\,t. \;\; y_i(\mathbf{x}_i^T \mathbf{w} + w_0) \geq M, \;\; i = \overline{1, n}.$$

Нужно описать, как решать такую задачу оптимизации и какими свойствами обладает ее решение.

Решение

1. Классы разделимы

Вместо использования ограничений, поделим обе части неравенства на модуль вектора весов. Эквивалентное неравенство:

$$\frac{1}{||\mathbf{w}||} y_i(\mathbf{x}_i^T \mathbf{w} + w_0) \geq M,$$

или, взяв $||\mathbf{w}|| = \frac{1}{M}$,

$$\min_{\mathbf{w}, w_0} ||\mathbf{w}||^2,$$

$$s.\,t.\;\; y_i(\mathbf{x}_i^T \mathbf{w} + w_0) \geq 1,\;\; i = \overline{1, n}.$$

Функция Лагранжа:

$$L = \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 - \sum_{i=1}^{N} \lambda_i (y_i(\mathbf{x}_i^T \mathbf{w} + w_0) - 1),$$

условия Каруша-Куна-Таккера:

- стационарности: $\max\limits_{\mathbf{x}} \ L = L(\hat{\mathbf{x}})$
- дополняющей нежесткости: $\lambda_i (y_i(\mathbf{x}_i^T \mathbf{w} + w_0) - 1) = 0, \ \ i = \overline{1, N}$
- неотрицательности: $\lambda_i \geq 0, \ \ i = \overline{1, N}$

Из условия стационарности мы должны приравнять производные к нулю по $\mathbf{w}$ и w_0.

$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i \mathbf{x}_i$$

$$0 = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i$$

Подставив эти значения в функцию Лагранжа, получим

$$L = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} \lambda_i \lambda_k y_i y_k \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_k,$$

и теперь нужно минимизировать $-L$ при $\lambda_i \geq 0$.

Условие дополняющей нежесткости:

$$\lambda_i(y_i(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w} + w_0) - 1) = 0,\ \ i = \overline{1, N}$$

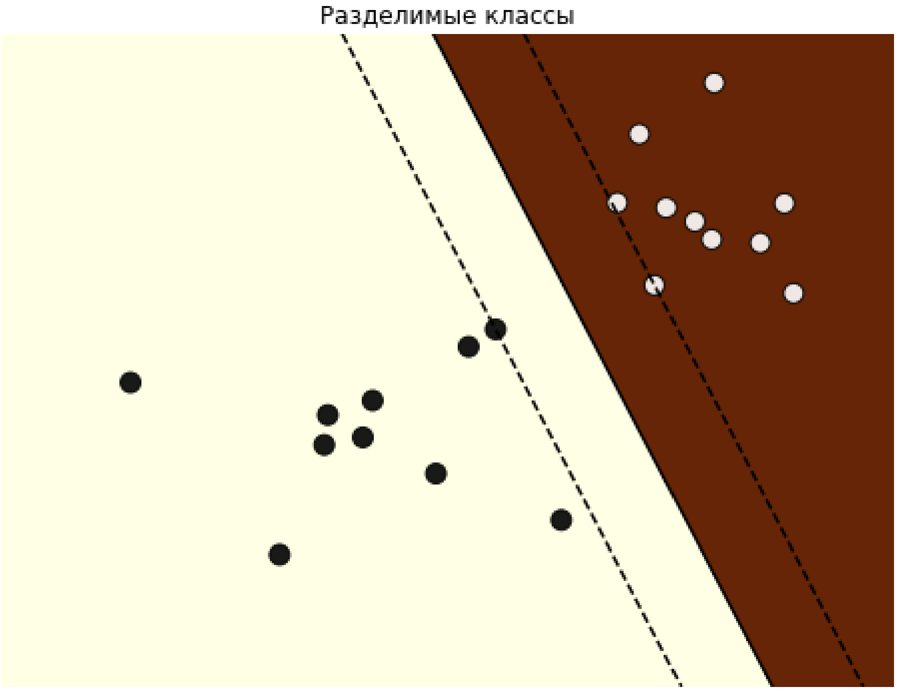
Либо $(y_i(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w} + w_0) = 1$ при $\lambda_i > 0$, то есть $\mathbf{x}_i$ лежит на *границе* разделяющей области, либо $(y_i(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w} + w_0) > 1$ при $\lambda_i = 0$, и тогда объект на границе не лежит.

$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i y_i \mathbf{x}_i$$

Вектор $\mathbf{w}$ есть линейной комбинацией так называемых **опорных объектов**, для которых выполнено условие $\lambda_i \neq 0$.

Чтобы найти w_0, нужно решить условие дополнительной нежесткости для одного из опорных объектов.

In [42]:
```
fig, axes = plt.subplots(1, 1, figsize=(8, 6))
plot_decision_function(clf_no_weights, sample_weight_constant, axes,
                       u"Разделимые классы")
plt.show()
```



2. **Неразделимые классы**

Разрешаем классификатору допускать ошибки, но будем за них ругать.

Аналогичным образом получаем следующую задачу с переменными $\mathbf{w}$, w_0, ξ, а также ценой ошибки C:

$$\min_{\mathbf{w},w_0} \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i,$$

$$s.\,t.\, \xi_i \geq 0,\;\; y_i(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w} + w_0) \geq 1 - \xi_i,\;\; i = \overline{1,n}.$$

Функция Лагранжа для данной задачи примет вид

$$L = \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i - \sum_{i=1}^{N}\lambda_i(y_i(\mathbf{x}_i\mathbf{w} + w_0) - (1 - \xi_i)) - \sum_{i=1}^{N}\mu_i\xi_i$$

Приравняв к нулю производные, получим

$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{N}\lambda_i y_i \mathbf{x}_i$$

$$0 = \sum_{i=1}^{N}\lambda_i y_i$$

$$\lambda_i = C - \mu_i$$

Функция Лагранжа может быть записана в таком виде:

$$L = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} \lambda_i \lambda_k y_i y_k \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_k$$

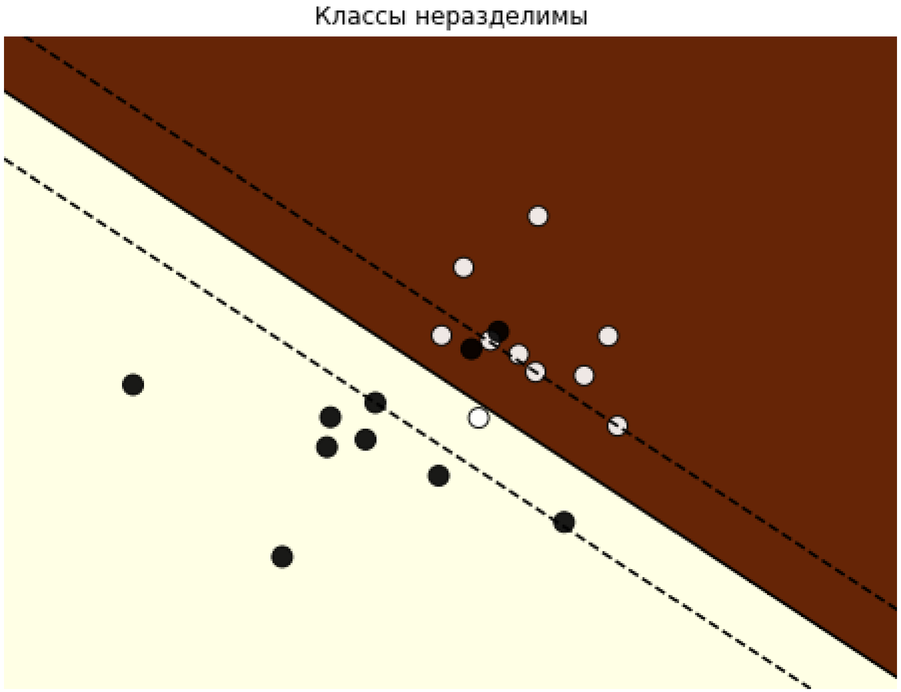
Вновь добавляем КТ-условия:

- дополняющей нежесткости:
  - $\lambda_i(y_i(\mathbf{x}_i^T \mathbf{w} + w_0) - (1 - \xi_i)) = 0, \ \ i = \overline{1, N}$
  - $\mu_i \xi_i = 0$
- неотрицательности: $\lambda_i \geq 0, \ \ i = \overline{1, N}$

Результат: $\mathbf{w}$ есть линейная комбинация *опорных векторов*.

In [45]:
```
fig, axes = plt.subplots(1, 1, figsize=(8, 6))
plot_decision_function(clf_no_weights, sample_weight_constant, axes,
                       u"Классы неразделимы")

plt.show()
```



3. *У объектов есть веса*

Мы продолжаем разрешать классификатору допускать ошибки, но теперь их стоимость различается для всех объектов выборки.

Запишем задачу:

$$\min_{\mathbf{w}, w_0} \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 + C\sum_{i=1}^{N} W_i \xi_i,$$

$$s.\, t.\, \xi_i \geq 0,\;\; y_i(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w} + w_0) \geq 1 - \xi_i,\;\; i = \overline{1, n}.$$

За W_i обозначен вес i-го объекта.

Функция Лагранжа для данной задачи примет вид

$$L = \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 + C\sum_{i=1}^{N} W_i\xi_i - \sum_{i=1}^{N}\lambda_i(y_i(\mathbf{x}_i\mathbf{w} + w_0) - (1 - \xi_i)) - \sum_{i=1}^{N}\mu_i\xi_i$$

Приравняв к нулю производные, получим

$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{N}\lambda_i y_i \mathbf{x}_i$$

$$0 = \sum_{i=1}^{N}\lambda_i y_i$$

$$\lambda_i = CW_i - \mu_i$$

КТ-условия не изменятся.

Единственная разница по сравнению с предыдущим случаем - другое ограничение на λ_i

При $C \to 0$ или $C \to +\infty$ $\ CW_i = C \ \Rightarrow$ влияние весов учтено не будет.

In [39]:

```
fig, axes = plt.subplots(1, 2, figsize=(14, 6))
plot_decision_function(clf_no_weights, sample_weight_constant, axes[0],
                       u"Без учета весов")
plot_decision_function(clf_weights, sample_weight_last_ten, axes[1],
                       u"С учетом весов")

plt.show()
```