Метод опорных векторов (SVM)

Метод опорных векторов (англ. *support vector machine*, *SVM*) — один из наиболее популярных методов обучения, который применяется для решения задач классификации и регрессии. Основная идея метода заключается в построении гиперплоскости, разделяющей объекты выборки оптимальным способом. Алгоритм работает в предположении, что чем больше расстояние (зазор) между разделяющей гиперплоскостью и объектами разделяемых классов, тем меньше будет средняя ошибка классификатора.

Содержание

Метод опорных векторов в задаче классификации

Рассмотрим задачу бинарной классификации, в которой объектам из $X = \mathbb{R}^n$ соответствует один из двух классов $Y = \{-1, +1\}$.

Пусть задана обучающая выборка пар "объект-ответ": $T^\ell = (\vec{x}_i, y_i)_{i=1}^\ell$. Необходимо построить алгоритм классификации $a(\vec{x}) : X \to Y$.

Разделяющая гиперплоскость

В пространстве $\mathbb{R}^n$ уравнение $\langle \vec{w}, \vec{x} \rangle - b = 0$ при заданных $\vec{w}$ и b определяет гиперплоскость — множество векторов $\vec{x} = (x_1, \ldots, x_n)$, принадлежащих пространству меньшей размерности $\mathbb{R}^{n-1}$. Например, для $\mathbb{R}^1$ гиперплоскостью является точка, для $\mathbb{R}^2$ — прямая, для $\mathbb{R}^3$ — плоскость и т.д. Параметр $\vec{w}$ определяет вектор нормали к гиперплоскости, а через $\frac{b}{\lVert \vec{w} \rVert}$ выражается расстояние от гиперплоскости до начала координат.

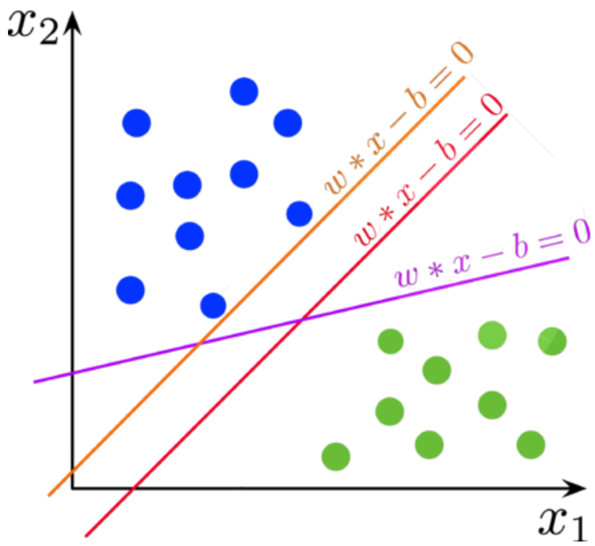
Гиперплоскость делит $\mathbb{R}^n$ на два полупространства: $\langle \vec{w}, \vec{x} \rangle - b > 0$ и $\langle \vec{w}, \vec{x} \rangle - b < 0$.

Говорят, что гиперплоскость разделяет два класса C_1 и C_2, если объекты этих классов лежат по разные стороны от гиперплоскости, то есть выполнено либо

$$\begin{cases} \langle \vec{w}, \vec{x} \rangle - b > 0, & \forall x \in C_1 \\ \langle \vec{w}, \vec{x} \rangle - b < 0, & \forall x \in C_2 \end{cases}$$

либо

$$\begin{cases} \langle \vec{w}, \vec{x} \rangle - b < 0, & \forall x \in C_1 \\ \langle \vec{w}, \vec{x} \rangle - b > 0, & \forall x \in C_2 \end{cases}$$



Примеры разделяющих гиперплоскостей в $\mathbb{R}^2$

Линейно разделимая выборка

Пусть выборка линейно разделима, то есть существует некоторая гиперплоскость, разделяющая классы -1 и $+1$. Тогда в качестве алгоритма классификации можно использовать линейный пороговый классификатор:

$$a(\vec{x}) = sign(\langle \vec{w}, \vec{x} \rangle - b) = sign\left(\sum_{i=1}^{\ell} w_i x_i - b\right)$$

где $\vec{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ — вектор значений признаков объекта, а $\vec{w} = (w_1, \ldots, w_n) \in \mathbb{R}^n$ и $b \in \mathbb{R}$ — параметры гиперплоскости.

Но для двух линейно разделимых классов возможны различные варианты построения разделяющих гиперплоскостей. Метод опорных векторов выбирает ту гиперплоскость, которая максимизирует отступ между классами:

Определение:

Отступ (англ. *margin*) — характеристика, оценивающая, насколько объект "погружён" в свой класс, насколько типичным представителем класса он является. Чем меньше значение отступа M_i, тем ближе объект $\vec{x}_i$ подходит к границе классов и тем выше становится вероятность ошибки. Отступ M_i отрицателен тогда и только тогда, когда алгоритм $a(x)$ допускает ошибку на объекте $\vec{x}_i$.

Для линейного классификатора отступ определяется уравнением: $M_i(\vec{w}, b) = y_i(\langle \vec{w}, \vec{x}_i \rangle - b)$

Если выборка линейно разделима, то существует такая гиперплоскость, отступ от которой до каждого объекта положителен:

$$\exists \vec{w}, b : \; M_i(\vec{w}, b) = y_i(\langle \vec{w}, \vec{x}_i \rangle - b) > 0, \; i = 1 \ldots \ell$$

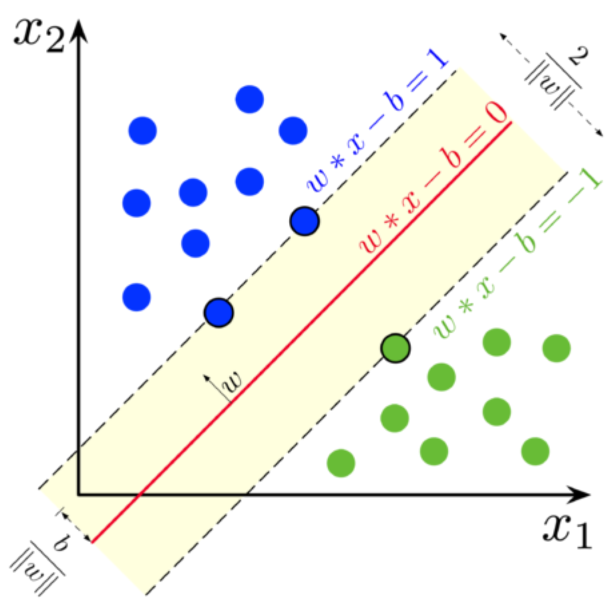
Мы хотим построить такую разделяющую гиперплоскость, чтобы объекты обучающей выборки находились на наибольшем расстоянии от неё.

Заметим, что при умножении $\vec{w}$ и b на константу $c \neq 0$ уравнение $\langle c\vec{w}, \vec{x} \rangle - cb = 0$ определяет ту же самую гиперплоскость, что и $\langle \vec{w}, \vec{x} \rangle - b = 0$. Для удобства проведём нормировку: выберем константу c таким образом, чтобы $\min M_i(\vec{w}, b) = 1$. При этом в каждом из двух классов найдётся хотя бы один "граничный" объект обучающей выборки, отступ которого равен этому минимуму: иначе можно было бы сместить гиперплоскость в сторону класса с большим отступом, тем самым увеличив минимальное расстояние от гиперплоскости до объектов обучающей выборки.

Обозначим любой "граничный" объект из класса $+1$ как $\vec{x}_+$, из класса -1 как $\vec{x}_-$. Их отступ равен единице, то есть

$$\begin{cases} M_+(\vec{w}, b) = (+1)(\langle \vec{w}, \vec{x}_+ \rangle - b) = 1 \\ M_-(\vec{w}, b) = (-1)(\langle \vec{w}, \vec{x}_- \rangle - b) = 1 \end{cases}$$

Нормировка позволяет ограничить разделяющую полосу между классами: $\{x : -1 < \langle \vec{w}, \vec{x}_i \rangle - b < 1\}$. Внутри неё не может лежать ни один объект обучающей выборки. Ширину разделяющей полосы можно выразить как проекцию вектора $\vec{x}_+ - \vec{x}_-$ на нормаль к гиперплоскости $\vec{w}$. Чтобы разделяющая гиперплоскость находилась на наибольшем расстоянии от точек выборки, ширина полосы должна быть максимальной:



Оптимальная разделяющая гиперплоскость в $\mathbb{R}^2$

$$\frac{\langle \vec{x}_+ - \vec{x}_-, \vec{w} \rangle}{\|w\|} = \frac{\langle \vec{x}_+, \vec{w} \rangle - \langle \vec{x}_-, \vec{w} \rangle - b + b}{\|w\|} = \frac{(+1)\left(\langle \vec{x}_+, \vec{w} \rangle - b\right) + (-1)\left(\langle \vec{x}_-, \vec{w} \rangle - b\right)}{\|w\|} =$$

$$= \frac{M_+(\vec{w}, b) + M_-(\vec{w}, b)}{\|w\|} = \frac{2}{\|w\|} \to \max \;\Rightarrow\; \|w\| \to \min$$

Это приводит нас к постановке задачи оптимизации в терминах квадратичного программирования:

$$\begin{cases} \|\vec{w}\|^2 \to \min\limits_{w,b} \\ M_i(\vec{w}, b) \geq 1, \quad i = 1, \ldots, \ell \end{cases}$$

Линейно неразделимая выборка

На практике линейно разделимые выборки практически не встречаются: в данных возможны выбросы и нечёткие границы между классами. В таком случае поставленная выше задача не имеет решений, и необходимо ослабить ограничения, позволив некоторым объектам попадать на "территорию" другого класса. Для каждого объекта отнимем от отступа некоторую положительную величину ξ_i, но потребуем чтобы эти введённые поправки были минимальны. Это приведёт к следующей постановке задачи, называемой также *SVM с мягким отступом* (англ. *soft-margin SVM*):

$$\begin{cases} \frac{1}{2}\|\vec{w}\|^2 + C\sum\limits_{i=1}^{\ell} \xi_i \to \min\limits_{w,b,\xi} \\ M_i(\vec{w}, b) \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \ldots, \ell \\ \xi_i \geq 0, \quad i = 1, \ldots, \ell \end{cases}$$

Мы не знаем, какой из функционалов $\frac{1}{2}\|\vec{w}\|^2$ и $\sum\limits_{i=1}^{\ell} \xi_i$ важнее, поэтому вводим коэффициент C, который будем оптимизировать с помощью кросс-валидации. В итоге мы получили задачу, у которой всегда есть единственное решение.

Заметим, что мы можем упростить постановку задачи:

$$\begin{cases} \xi_i \geq 0 \\ \xi_i \geq 1 - M_i(\vec{w}, b) \\ \sum\limits_{i=1}^{\ell} \xi_i \to \min \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \xi_i \geq \max(0, 1 - M_i(\vec{w}, b)) \\ \sum\limits_{i=1}^{\ell} \xi_i \to \min \end{cases} \Rightarrow \xi_i = (1 - M_i(\vec{w}, b))_+$$

Получим эквивалентную задачу безусловной минимизации:

$$\frac{1}{2}\|\vec{w}\|^2 + C \sum\limits_{i=1}^{\ell} \left(1 - M_i(\vec{w}, b)\right)_+ \to \min\limits_{w,b}$$

Теперь научимся её решать.

Теорема (Условия Каруша—Куна—Таккера):

Пусть поставлена задача нелинейного программирования с ограничениями:

$$\begin{cases} f(x) \to \min\limits_{x \in X} \\ g_i(x) \leq 0,\ i = 1 \ldots m \\ h_j(x) = 0,\ j = 1 \ldots k \end{cases}$$

Если x — точка локального минимума при наложенных ограничениях, то существуют такие множители $\mu_i, i = 1 \ldots m,\ \lambda_j, j = 1 \ldots k$, что для функции Лагранжа $L(x; \mu, \lambda)$ выполняются условия:

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial x} = 0, \quad L(x; \mu, \lambda) = f(x) + \sum\limits_{i=1}^{m} \mu_i g_i(x) + \sum\limits_{j=1}^{k} \lambda_j h_j(x) \\ g_i(x) \leq 0,\ h_j(x) = 0 \quad (\text{исходные ограничения}) \\ \mu_i \geq 0 \quad (\text{двойственные ограничения}) \\ \mu_i g_i(x) = 0 \quad (\text{условие дополняющей нежёсткости}) \end{cases}$$

При этом искомая точка является седловой точкой функции Лагранжа: минимумом по x и максимумом по двойственным переменным μ.

По теореме Каруша—Куна—Таккера, поставленная нами задача минимизации эквивалентна двойственной задаче поиска седловой точки функции Лагранжа:

$$\mathscr{L}(\vec{w}, b, \xi; \lambda, \eta) = \frac{1}{2}\|w\|^2 - \sum\limits_{i=1}^{\ell} \lambda_i \left(M_i(\vec{w}, b) - 1\right) - \sum\limits_{i=1}^{\ell} \xi_i \left(\lambda_i + \eta_i - C\right)$$

λ_i — переменные, двойственные к ограничениям $M_i \geq 1 - \xi_i$

η_i — переменные, двойственные к ограничениям $\xi_i \geq 0$

Запишем необходимые условия седловой точки функции Лагранжа:

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial w} = 0, \quad \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial b} = 0, \quad \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \xi} = 0 \\ \xi_i \geq 0, \quad \lambda_i \geq 0, \quad \eta_i \geq 0, & i = 1, \ldots, \ell \\ \lambda_i = 0 \text{ либо } M_i(\vec{w}, b) = 1 - \xi_i, & i = 1, \ldots, \ell \\ \eta_i = 0 \text{ либо } \xi_i = 0, & i = 1, \ldots, \ell \end{cases}$$

Продифференцируем функцию Лагранжа и приравняем к нулю производные. Получим следующие ограничения:

$$\begin{array}{ll} \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial w} = \vec{w} - \sum\limits_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i \vec{x}_i = 0 & \Rightarrow \quad \vec{w} = \sum\limits_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i \vec{x}_i \\ \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial b} = -\sum\limits_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i = 0 & \Rightarrow \quad \sum\limits_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i = 0 \\ \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \xi_i} = -\lambda_i - \eta_i + C = 0 & \Rightarrow \quad \eta_i + \lambda_i = C, \quad i = 1, \ldots, \ell \end{array}$$

Заметим, что $\eta_i \geq 0, \lambda_i \geq 0, C > 0$, поэтому из последнего ограничения получаем $0 \leq \eta_i \leq C$, $0 \leq \lambda_i \leq C$.

Диапазон значений λ_i (которые, как указано выше, соответствуют ограничениям на величину отступа) позволяет нам разделить объекты обучающей выборки на три типа:

1. $\lambda_i = 0 \; \Rightarrow \; \eta_i = C; \; \xi_i = 0; \; M_i \geq 1$ — периферийные (неинформативные) объекты
   Эти объекты лежат в своём классе, классифицируются верно и не влияют на выбор разделяющей гиперплоскости (см. уравнение для $\vec{w}$)
2. $0 < \lambda_i < C \; \Rightarrow \; 0 < \eta_i < C; \; \xi_i = 0; \; M_i = 1$ — опорные граничные объекты
   Эти объекты лежат ровно на границе разделяющей полосы на стороне своего класса
3. $\lambda_i = C \; \Rightarrow \; \eta_i = 0; \; \xi_i > 0; \; M_i < 1$ — опорные объекты-нарушители
   Эти объекты лежат внутри разделяющей полосы или на стороне чужого класса

Определение:

Опорный объект (опорный вектор, англ. *support vector*) — объект $\vec{x}_i$, соответствующий которому множитель Лагранжа отличен от нуля: $\lambda_i \neq 0$.

Теперь подставим ограничения, которые мы получили при дифференцировании, в функцию Лагранжа. Получим следующую постановку двойственной задачи, которая зависит только от двойственных переменных λ:

$$\begin{cases} -\mathscr{L}(\lambda) = -\sum\limits_{i=1}^{\ell} \lambda_i + \frac{1}{2} \sum\limits_{i=1}^{\ell} \sum\limits_{j=1}^{\ell} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle \vec{x}_i, \vec{x}_j \rangle \to \min\limits_{\lambda} \\ 0 \leq \lambda_i \leq C, \quad i = 1, \ldots, \ell \\ \sum\limits_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i = 0 \end{cases}$$

Это также задача квадратичного программирования. Решение задачи лежит в пересечении ℓ-мерного куба с ребром C и гиперплоскости $\langle \lambda, y \rangle = 0$, что является выпуклым многогранником размерности $\ell - 1$. В этом многограннике нужно найти минимум выпуклого квадратичного функционала. Следовательно, данная задача имеет единственное решение.

Существуют различные методы поиска решения: можно воспользоваться универсальным солвером задачи квадратичного программирования (CPLEX (https://www.ibm.com/analytics/cplex-optimizer), Gurobi (http://www.gurobi.com/)), либо алгоритмом, учитывающим специфические особенности SVM (SMO (https://www.microsoft.com/en-us/research/publication/sequential-minimal-optimization-a-fast-algorithm-for-training-support-vector-machines/), INCAS (http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi=10.1.1.10.9956)).

После того, как мы получили вектор коэффициентов $\vec{\lambda}$, можем выразить решение прямой задачи через решение двойственной:

$$\begin{cases} \vec{w} = \sum\limits_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i \vec{x}_i \\ b = \langle \vec{w}, \vec{x}_i \rangle - y_i, \quad \forall i : \lambda_i > 0, M_i = 1 \end{cases}$$

На практике для повышения вычислительной устойчивости рекомендуется при расчёте b брать медиану по опорным граничным объектам:

$$b = med\{ \langle \vec{w}, \vec{x}_i \rangle - y_i : \lambda_i > 0, M_i = 1, i = 1, \dots, \ell \}$$

Теперь можем переписать наш линейный классификатор, выразив $\vec{w}$ через $\vec{\lambda}$:

$$a(x) = sign \left(\sum\limits_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i \langle \vec{x}_i, \vec{x} \rangle - b \right)$$

Нелинейное обобщение, kernel trick

Существует ещё один подход к решению проблемы линейной разделимости, известный как трюк с ядром (kernel trick). Если выборка объектов с признаковым описанием из $X = \mathbb{R}^n$ не является линейно разделимой, мы можем предположить, что существует некоторое пространство H, вероятно, большей размерности, при переходе в которое выборка станет линейно разделимой. Пространство H здесь называют спрямляющим, а функцию перехода $\psi : X \to H$ — спрямляющим отображением. Построение SVM в таком случае происходит так же, как и раньше, но в качестве векторов признаковых описаний используются векторы $\psi(\vec{x})$, а не $\vec{x}$. Соответственно, скалярное произведение $\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 \rangle$ в пространстве X везде заменяется скалярным произведением $\langle \psi(\vec{x}_1), \psi(\vec{x}_2) \rangle$ в пространстве H. Отсюда следует, что пространство H должно быть гильбертовым, так как в нём должно быть определено скалярное произведение.

Обратим внимание на то, что постановка задачи и алгоритм классификации не используют в явном виде признаковое описание и оперируют только скалярными произведениями признаков объектов. Это даёт возможность заменить скалярное произведение в пространстве X на ядро — функцию, являющуюся скалярным произведением в некотором H. При этом можно вообще не строить спрямляющее пространство в явном виде, и вместо подбора ψ подбирать непосредственно ядро.

Постановка задачи с применением ядер приобретает вид:

$$\begin{cases} -\mathscr{L}(\lambda) = -\sum\limits_{i=1}^{\ell} \lambda_i + \frac{1}{2} \sum\limits_{i=1}^{\ell} \sum\limits_{j=1}^{\ell} \lambda_i \lambda_j y_i y_j K(\vec{x}_i, \vec{x}_j) \to \min\limits_{\lambda} \\ 0 \le \lambda_i \le C, \quad i = 1, \dots, \ell \\ \sum\limits_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i = 0 \end{cases}$$

$$a(x) = sign\left(\sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i K(\vec{x}_i, \vec{x}) - b\right)$$

Преимущества и недостатки SVM

Преимущества SVM перед методом стохастического градиента и нейронными сетями:

- Задача выпуклого квадратичного программирования хорошо изучена и имеет единственное решение.
- Метод опорных векторов эквивалентен двухслойной нейронной сети, где число нейронов на скрытом слое определяется автоматически как число опорных векторов.
- Принцип оптимальной разделяющей гиперплоскости приводит к максимизации ширины разделяющей полосы, а следовательно, к более уверенной классификации.

Недостатки классического SVM:

- Неустойчивость к шуму: выбросы в исходных данных становятся опорными объектами-нарушителями и напрямую влияют на построение разделяющей гиперплоскости.
- Не описаны общие методы построения ядер и спрямляющих пространств, наиболее подходящих для конкретной задачи.
- Нет отбора признаков.
- Необходимо подбирать константу C при помощи кросс-валидации.

Модификации

Существуют различные дополнения и модификации метода опорных векторов, направленные на устранение описанных недостатков:

- Метод релевантных векторов (Relevance Vector Machine, RVM) (http://jmlr.csail.mit.edu/papers/v1/tipping01a.html)
- 1-norm SVM (LASSO SVM) (https://papers.nips.cc/paper/2450-1-norm-support-vector-machines.pdf)
- Doubly Regularized SVM (ElasticNet SVM) (http://www3.stat.sinica.edu.tw/statistica/oldpdf/A16n214.pdf)
- Support Features Machine (SFM) (https://arxiv.org/abs/1901.09643v1)
- Relevance Features Machine (RFM) (http://www.robots.ox.ac.uk/~minhhoai/papers/SVMFeatureWeight_PR.pdf)

Примеры кода

Пример на языке Java

Пример классификации с применением `smile.classification.SVM`[1]

`Maven` зависимость:

```
<dependency>
  <groupId>com.github.haifengl</groupId>
  <artifactId>smile-core</artifactId>
  <version>1.5.2</version>
</dependency>
```

```
import smile.classification.SVM;
import smile.data.NominalAttribute;
import smile.data.parser.DelimitedTextParser;
import smile.math.kernel.GaussianKernel;
import java.util.Arrays;
```

```
// read train & test dataset
var parser = new DelimitedTextParser();
parser.setResponseIndex(new NominalAttribute("class"), 0);
var train   = parser.parse("USPS Train", this.getClass().getResourceAsStream("/smile/data/usps/zip.train"));
var test    = parser.parse("USPS Test", this.getClass().getResourceAsStream("/smile/data/usps/zip.test"));
var classes = Arrays.stream(test.labels()).max().orElse(0) + 1;
// build SVM classifier
var svm     = new SVM<>(new GaussianKernel(8.0), 5.0, classes, SVM.Multiclass.ONE_VS_ONE);
svm.learn(train.x(), train.labels());
svm.finish();
// calculate test error rate
var error = 0;
for (int i = 0; i < test.x().length; i++) {
 if (svm.predict(test.x()[i]) != test.labels()[i]) {
   error++;
  }
}
System.out.format("USPS error rate = %.2f%%\n", 100.0 * error / test.x().length);
```

Пример на языке R

```
# importing package and its' dependencies
library(caret)

#reading data
data <- read.csv("input.csv", sep = ',', header = FALSE)

# splitting data into train and test sets
index <- createDataPartition(y = data$target, p = 0.8, list = FALSE)
training <- data[index,]
testing <- data[-index,]

# evaluating model
fit <- train(target ~ x + y + z,
             data = train_flats,
             method = "svmRadial",
             trControl = trainControl(method = "repeatedcv", number = 10, repeats = 3))

# printing parameters
print(fit)
```

См. также

- Общие понятия
- Ядра

- Обзор библиотек для машинного обучения на Python

Примечания

1. Smile, SVM (https://haifengl.github.io/smile/api/java/smile/classification/SVM.html/)

Источники информации

- machinelearning.ru — Машина опорных векторов (http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=%D0%9C%D0%B0%D1%88%D0%B8%D0%BD%D0%B0_%D0%BE%D0%BF%D0%BE%D1%80%D0%BD%D1%8B%D1%85_%D0%B2%D0%B5%D0%BA%D1%82%D0%BE%D1%80%D0%BE%D0%B2)
- Лекция "Линейные методы классификации: метод опорных векторов" (https://www.youtube.com/watch?v=Adi67_94_gc&list=PLJOzdkh8T5kp99tGTEFjH_b9zqEQiiBtC&index=5) — К.В. Воронцов, курс "Машинное обучение" 2014
- Wikipedia — Метод опорных векторов (https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9C%D0%B5%D1%82%D0%BE%D0%B4_%D0%BE%D0%BF%D0%BE%D1%80%D0%BD%D1%8B%D1%85_%D0%B2%D0%B5%D0%BA%D1%82%D0%BE%D1%80%D0%BE%D0%B2)
- Alexey Nefedov — Support Vector Machines: A Simple Tutorial (https://svmtutorial.online/)
- John Platt — Sequential Minimal Optimization: A Fast Algorithm for Training Support Vector Machines (https://www.microsoft.com/en-us/research/publication/sequential-minimal-optimization-a-fast-algorithm-for-training-support-vector-machines/)
- Shai Fine, Katya Scheinberg — INCAS: An Incremental Active Set Method for SVM (http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi=10.1.1.10.9956)