

Лекция 14

Ядра в машинном обучении

Е. А. Соколов
ФКН ВШЭ

27 января 2022 г.

1 Ядровой SVM

Вспомним, что метод опорных векторов сводится к решению задачи оптимизации

$$\begin{cases} \frac{1}{2}\|w\|^2 + C \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \rightarrow \min_{w,b,\xi} \\ y_i (\langle w, x_i \rangle + b) \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, \ell, \\ \xi_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, \ell. \end{cases} \quad (1.1)$$

Построим двойственную к ней. Запишем лагранжиан:

$$L(w, b, \xi, \lambda, \mu) = \frac{1}{2}\|w\|^2 + C \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i - \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i [y_i (\langle w, x_i \rangle + b) - 1 + \xi_i] - \sum_{i=1}^{\ell} \mu_i \xi_i.$$

Выпишем условия Куна-Таккера:

$$\nabla_w L = w - \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i x_i = 0 \quad \implies \quad w = \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i x_i \quad (1.2)$$

$$\nabla_b L = - \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i = 0 \quad \implies \quad \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i = 0 \quad (1.3)$$

$$\nabla_{\xi_i} L = C - \lambda_i - \mu_i \quad \implies \quad \lambda_i + \mu_i = C \quad (1.4)$$

$$\lambda_i [y_i (\langle w, x_i \rangle + b) - 1 + \xi_i] = 0 \quad \implies \quad (\lambda_i = 0) \text{ или } (y_i (\langle w, x_i \rangle + b) = 1 - \xi_i) \quad (1.5)$$

$$\mu_i \xi_i = 0 \quad \implies \quad (\mu_i = 0) \text{ или } (\xi_i = 0) \quad (1.6)$$

$$\xi_i \geq 0, \lambda_i \geq 0, \mu_i \geq 0. \quad (1.7)$$

Проанализируем полученные условия. Из (1.2) следует, что вектор весов, полученный в результате настройки SVM, можно записать как линейную комбинацию объектов, причем веса в этой линейной комбинации можно найти как решение двойственной задачи. В зависимости от значений ξ_i и λ_i объекты x_i разбиваются на три категории:

1. $\xi_i = 0, \lambda_i = 0$.

Такие объекты не влияют решение w (входят в него с нулевым весом λ_i), правильно классифицируются ($\xi_i = 0$) и лежат вне разделяющей полосы. Объекты этой категории называются *периферийными*.

2. $\xi_i = 0, 0 < \lambda_i < C$.

Из условия (1.5) следует, что $y_i (\langle w, x_i \rangle + b) = 1$, то есть объект лежит строго на границе разделяющей полосы. Поскольку $\lambda_i > 0$, объект влияет на решение w . Объекты этой категории называются *опорными граничными*.

3. $\xi_i > 0, \lambda_i = C$.

Такие объекты могут лежать внутри разделяющей полосы ($0 < \xi_i < 2$) или выходить за ее пределы ($\xi_i \geq 2$). При этом если $0 < \xi_i < 1$, то объект классифицируется правильно, в противном случае — неправильно. Объекты этой категории называются *опорными нарушителями*.

Отметим, что варианта $\xi_i > 0, \lambda_i < C$ быть не может, поскольку при $\xi_i > 0$ из условия дополняющей нежесткости (1.6) следует, что $\mu_i = 0$, и отсюда из уравнения (1.4) получаем, что $\lambda_i = C$.

Итак, итоговый классификатор зависит только от объектов, лежащих на границе разделяющей полосы, и от объектов-нарушителей (с $\xi_i > 0$).

Построим двойственную функцию. Для этого подставим выражение (1.2) в лагранжиан, и воспользуемся уравнениями (1.3) и (1.4) (данные три уравнения выполнены для точки минимума лагранжиана при любых фиксированных λ и μ):

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2} \left\| \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i x_i \right\|^2 - \sum_{i,j=1}^{\ell} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle - b \underbrace{\sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i}_0 + \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i + \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \underbrace{(C - \lambda_i - \mu_i)}_0 \\ &= \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\ell} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle. \end{aligned}$$

Мы должны потребовать выполнения условий (1.3) и (1.4) (если они не выполнены, то двойственная функция обращается в минус бесконечность), а также неотрицательность двойственных переменных $\lambda_i \geq 0, \mu_i \geq 0$. Ограничение на μ_i и условие (1.4), можно объединить, получив $\lambda_i \leq C$. Приходим к следующей двойственной задаче:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\ell} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle \rightarrow \max_{\lambda} \\ 0 \leq \lambda_i \leq C, \quad i = 1, \dots, \ell, \\ \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i = 0. \end{cases} \quad (1.8)$$

Она также является вогнутой, квадратичной и имеет единственный максимум.

Двойственная задача SVM зависит только от скалярных произведений объектов — отдельные признаковые описания никак не входят в неё. Значит, можно легко

сделать ядровой переход:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\ell} \lambda_i \lambda_j y_i y_j K(x_i, x_j) \rightarrow \max_{\lambda} \\ 0 \leq \lambda_i \leq C, \quad i = 1, \dots, \ell, \\ \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i = 0. \end{cases} \quad (1.9)$$

Вернемся к тому, какое представление классификатора дает двойственная задача. Из уравнения (1.2) следует, что вектор весов w можно представить как линейную комбинацию объектов из обучающей выборки. Подставляя это представление w в классификатор, получаем

$$a(x) = \text{sign} \left(\sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i \langle x_i, x \rangle + b \right). \quad (1.10)$$

Таким образом, классификатор измеряет сходство нового объекта с объектами из обучения, вычисляя скалярное произведение между ними. Это выражение также зависит только от скалярных произведений, поэтому в нём тоже можно перейти к ядру.

В представлении (1.10) фигурирует переменная b , которая не находится непосредственно в двойственной задаче. Однако ее легко восстановить по любому граничному опорному объекту x_i , для которого выполнено $\xi_i = 0, 0 < \lambda_i < C$. Для него выполнено $y_i (\langle w, x_i \rangle + b) = 1$, откуда получаем

$$b = y_i - \langle w, x_i \rangle.$$

Как правило, для численной устойчивости берут медиану данной величины по всем граничным опорным объектам:

$$b = \text{med} \{ y_i - \langle w, x_i \rangle \mid \xi_i = 0, 0 < \lambda_i < C \}.$$

Связь с kNN. Если использовать гауссовское ядро (или, как его еще называют, RBF-ядро) в методе опорных векторов, то получится следующее решающее правило:

$$a(x) = \text{sign} \sum_{i=1}^{\ell} y_i \lambda_i \exp \left(-\frac{\|x - x_i\|^2}{2\sigma^2} \right).$$

Вспомним теперь, что решающее правило в методе k ближайших соседей выглядит как

$$a(x) = \arg \max_{y \in Y} \Gamma_y(x, X^{\ell}); \quad \Gamma_y(x, X^{\ell}) = \sum_{i=1}^{\ell} [y_x^{(i)} = y] w(i, x),$$

где $w(i, x)$ — оценка важности i -го соседа для классификации объекта x , а $y_x^{(i)}$ — метка i -го ближайшего соседа. Для случая двух классов $\{+1, -1\}$ решающее правило

можно записать как знак разности оценок за эти классы:

$$\begin{aligned}
 a(x) &= \text{sign}(\Gamma_{+1}(x, X^\ell) - \Gamma_{-1}(x, X^\ell)) = \\
 &= \text{sign}\left(\sum_{i=1}^{\ell} [y_x^{(i)} = +1] w(i, x) - \sum_{i=1}^{\ell} [y_x^{(i)} = -1] w(i, x)\right) = \\
 &= \text{sign} \sum_{i=1}^{\ell} ([y_x^{(i)} = +1] - [y_x^{(i)} = -1]) w(i, x) = \\
 &= \text{sign} \sum_{i=1}^{\ell} y_x^{(i)} w(i, x).
 \end{aligned}$$

Заметим, что решающие правила метода опорных векторов с RBF-ядром и метода k ближайших соседей совпадут, если положить

$$w(i, x) = \lambda_{(i)} \exp\left(-\frac{\|x - x_{(i)}\|^2}{2\sigma^2}\right).$$

То есть SVM-RBF — это метод ℓ ближайших соседей, использующий гауссово ядро в качестве функции расстояния, и настраивающий веса объектов путем максимизации отступов.

2 Аппроксимация спрямляющего пространства

Все ядровые методы используют матрицу Грама $G = XX^T$ вместо матрицы «объекты-признаки» X . Это позволяет сохранять сложность методов при сколь угодно большой размерности спрямляющего пространства, но работа с матрицей Грама для больших выборок может стать затруднительной. Так, уже при выборках размером в сотни тысяч объектов хранение этой матрицы потребует большого количества памяти, а обращение станет трудоёмкой задачей, поскольку требует $O(\ell^3)$ операций.

Решением данной проблемы может быть построение в явном виде такого преобразования $\tilde{\varphi}(x)$, которое переводит объекты в пространство не очень большой размерности, и в котором можно напрямую обучать любые модели. Мы разберём метод случайных признаков Фурье (иногда также называется Random Kitchen Sinks) [1], который обладает свойством аппроксимации скалярного произведения:

$$\langle \tilde{\varphi}(x), \tilde{\varphi}(z) \rangle \approx K(x, z).$$

Из комплексного анализа известно, что любое непрерывное ядро вида $K(x, z) = K(x - z)$ является преобразованием Фурье некоторого вероятностного распределения (теорема Бохнера):

$$K(x - z) = \int_{\mathbb{R}^d} p(w) e^{iw^T(x-z)} dw.$$

Преобразуем интеграл:

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathbb{R}^d} p(w) e^{iw^T(x-z)} dw &= \int_{\mathbb{R}^d} p(w) \cos(w^T(x-z)) dw + i \int_{\mathbb{R}^d} p(w) \sin(w^T(x-z)) dw = \\
 &= \int_{\mathbb{R}^d} p(w) \cos(w^T(x-z)) dw.
 \end{aligned}$$

Поскольку значение ядра $K(x - z)$ всегда вещественное, то и в правой части мнимая часть равна нулю — а значит, остаётся лишь интеграл от косинуса $\cos w^T(x - z)$. Мы можем приблизить данный интеграл методом Монте-Карло:

$$\int_{\mathbb{R}^d} p(w) \cos(w^T(x - z)) dw \approx \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \cos(w_j^T(x - z)),$$

где векторы w_1, \dots, w_n генерируются из распределения $p(w)$. Используя эти векторы, мы можем сформировать аппроксимацию преобразования $\varphi(x)$:

$$\tilde{\varphi}(x) = \frac{1}{\sqrt{n}} (\cos(w_1^T x), \dots, \cos(w_n^T x), \sin(w_1^T x), \dots, \sin(w_n^T x)).$$

Действительно, в этом случае скалярное произведение новых признаков будет иметь вид

$$\begin{aligned} \tilde{K}(x, z) &= \langle \tilde{\varphi}(x), \tilde{\varphi}(z) \rangle = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (\cos(w_j^T x) \cos(w_j^T z) + \sin(w_j^T x) \sin(w_j^T z)) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \cos(w_j^T(x - z)). \end{aligned}$$

Данная оценка является несмещённой для $K(x, z)$ в силу свойств метода Монте-Карло. Более того, с помощью неравенств концентрации меры можно показать, что дисперсия данной оценки достаточно низкая. Например, для гауссова ядра будет иметь место неравенство для некоторых констант C и ε :

$$\mathbb{P} \left[\sup_{x, z} |\tilde{K}(x, z) - K(x, z)| \geq \varepsilon \right] \leq (C/\varepsilon)^2 \exp(-n\varepsilon^2/4(d+2)).$$

Разумеется, найти распределение $p(w)$ можно не для всех ядер $K(x - z)$. Как правило, данный метод используется для гауссовых ядер $\exp(\|x - z\|^2/2\sigma^2)$ — для них распределение $p(w)$ будет нормальным с нулевым матожиданием и дисперсией σ^2 .

Список литературы

- [1] *Rahimi, Ali and Recht, Benjamin* Random Features for Large-scale Kernel Machines. // Proceedings of the 20th International Conference on Neural Information Processing Systems, 2007.