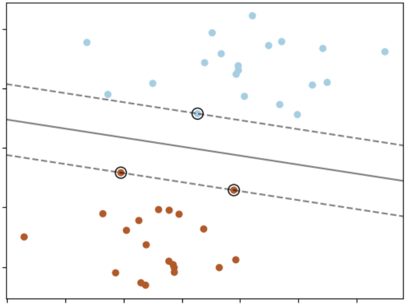
Метод опорных векторов

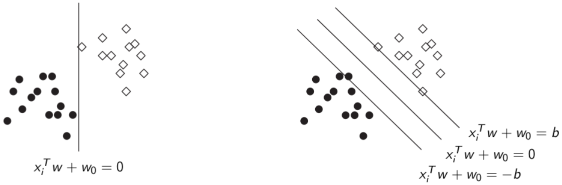
Виктор Китов

v.v.kitov@yandex.ru



Содержание

Метод опорных векторов



Рассмотрим бинарную классификацию $y \in \{+1, -1\}$ линейно разделимой выборки.

Идея метода опорных векторов (support vector machines, SVM)

Выберем гиперплоскость, разделяющую классы с максимальным зазором.

Гиперплоскости $x_i^T w + w_0 = 0$, $x_i^T w + w_0 = b$, $x_i^T w + w_0 = -b$ поэтому величина зазора $\frac{2b}{\|w\|}$.

Метод опорных векторов

Объекты (x_i, y_i) отделены от разделяющей гиперплоскости $\geq \frac{b}{\|w\|}$, если

$$\begin{cases} x_i^T w + w_0 \geq b, & y_i = +1 \\ x_i^T w + w_0 \leq -b & y_i = -1 \end{cases} \quad i = 1, 2, ... N.$$

Это можно записать в виде

$$y_i(x_i^T w + w_0) \geq b, \quad i = 1, 2, ... N.$$

Максимизация зазора между классами:

$$2b / \|w\| \to \max_{w, w_0, b}$$

Оптимизационная задача

Оптимизационная задача:

$$\begin{cases} \frac{2b}{\|w\|} \to \max\limits_{w,w_0,b} \\ y_i(x_i^T w + w_0) \geq b, \quad i = 1, 2, ...N. \end{cases}$$

Если (w, w_0, b)-решение, то $(\alpha w, \alpha w_0, \alpha b)$ - тоже решение $\forall \alpha > 0$. Положим $b = 1$ $(\alpha = \frac{1}{b})$.

$$\begin{cases} \frac{2}{\|w\|} \to \max\limits_{w,w_0} \\ y_i(x_i^T w + w_0) \geq 1 \quad i = 1, 2, ...N. \end{cases}$$

Используя свойство $\arg\max \frac{2}{\|w\|} = \arg\min \frac{\|w\|}{2} = \arg\min \frac{\|w\|^2}{2}$:

$$\begin{cases} \frac{1}{2} w^T w \to \min\limits_{w,w_0} \\ y_i(x_i^T w + w_0) = M(x_i, y_i) \geq 1, \quad i = 1, 2, ...N. \end{cases}$$

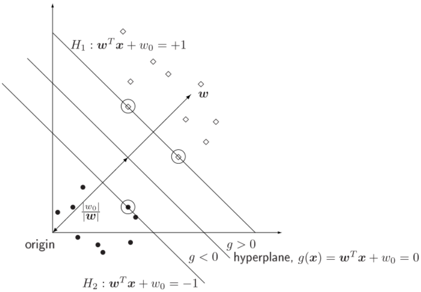
Типы объектов

Неинформативные объекты: $y_i(x_i^T w + w_0) > 1$

- не влияют на решение

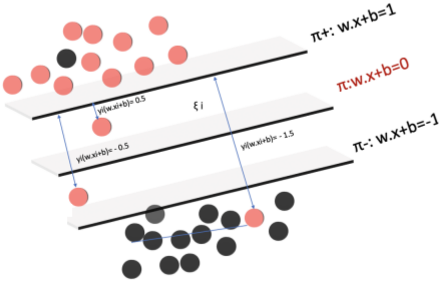
Опорные вектора: $y_i(x_i^T w + w_0) = 1$

- лежат на расстоянии $1/\|w\|$ к разделяющей гиперплоскости
- влияют на решение



Содержание

Линейно неразделимый случай



$$\begin{cases} \frac{1}{2} w^T w \to \min\limits_{w, w_0} \\ y_i(x_i^T w + w_0) = M(x_i, y_i) \geq 1, \quad i = 1, 2, \ldots N. \end{cases}$$

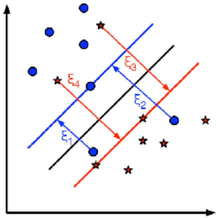
Ограничения становятся несовместными=>пустое множество решений.

Линейно неразделимый случай

Разрешим частичные нарушения ограничений на величины нарушений ξ_i (slack variables):

$$\begin{cases} \frac{1}{2}w^T w + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i \to \min_{w,w_0,\xi} \\ y_i(w^T x_i + w_0) = M(x_i, y_i) \geq 1 - \xi_i,\ i = 1, 2, \dots N \\ \xi_i \geq 0,\ i = 1, 2, \dots N \end{cases}$$

- Штраф за нарушение C контролирует точность модели (в противовес простоте).
- Подбирается по сетке на валидации.
- Другие штрафы возможны, например $C\sum_i \xi_i^2$.



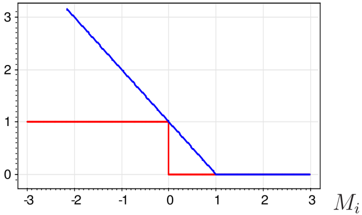
Типы объектов

- **Неинформативные объекты**:
  - $y_i(w^T x_i + w_0) > 1$
- **Опорные вектора** SV**:**
  - $y_i(w^T x_i + w_0) \leq 1$
  - **пограничные** $\widetilde{SV}$:
    - $y_i(w^T x_i + w_0) = 1$
  - **объекты-нарушители**:
    - $y_i(w^T x_i + w_0) > 0$: нарушитель корректно классифицирован
    - $y_i(w^T x_i + w_0) < 0$: нарушитель некорректно классифицирован

Безусловная оптимизация

Оптимизационная задача:

$$\begin{cases} \frac{1}{2}w^Tw + C\sum_{i=1}^N \xi_i \to \min_{w,w_0,\xi} \\ y_i(w^Tx_i + w_0) = M_i(w,w_0) \geq 1 - \xi_i, \\ \xi_i \geq 0, \ i = 1,2,\dots N \end{cases}$$



может быть переписана как

$$\frac{1}{2C}\|w\|_2^2 + \sum_{i=1}^N [1 - M_i(w,w_0)]_+ \to \min_{w,w_0}$$

Таким образом, метод - линейный классификатор с функцией потерь $\mathcal{L}(M) = [1-M]_+$ и L_2 регуляризацией (обобщается на другие).

Разреженность решения

- Решение зависит только от опорных векторов.
- Это видно из условия $\mathcal{L}(M) = 0$ для $M \geq 1$.
    - хорошо классифицированные объекты с $M \geq 1$ не влияют на решение
- Разреженность решения - метод менее устойчив к выбросам
    - выбросы - всегда опорные объекты

Заключение

- Метод опорных векторов - линейный классификатор с L_2 регуляризацией и функцией потерь hinge.
- Геометрически метод максимизирует зазор между классами.
- Решение зависит только от опорных векторов с $M \leq 1$.