Машинное обучение (Machine Learning)

Метод опорных векторов (Support Vector Machine - SVM)

Уткин Л.В.

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

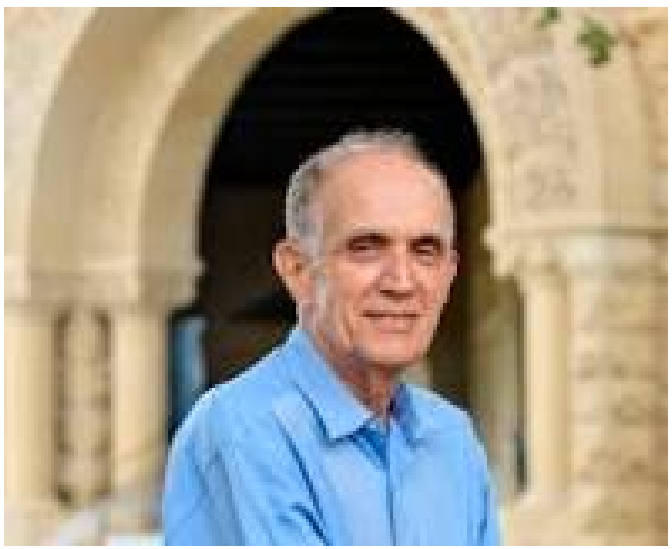
Содержание

Презентация является компиляцией и заимствованием материалов из замечательных курсов и презентаций по машинному обучению:

К.В. Воронцова, А.Г. Дьяконова, Н.Ю. Золотых, С.И. Николенко, Andrew Moore, Lior Rokach, Rong Jin, Luis F. Teixeira, Alexander Statnikov и других.

О машине опорных векторов

"New methods always look better than old ones.
Neural nets are better than logistic regression,
support vector machines are better than neural nets, etc."
- Brad Efron



Немного истории

- Первые идеи метода были предложены еще в 1950-е годы.
- Метод был создан на основе статистической теории обучения
- Метод стал известен и популярен после замечательной статьи (Вапник и др.) в 1992 г.
- В настоящее время метод успешно используется во многих областях.
- Метод также был модифицирован для задач регрессии.

Что мы хотим?

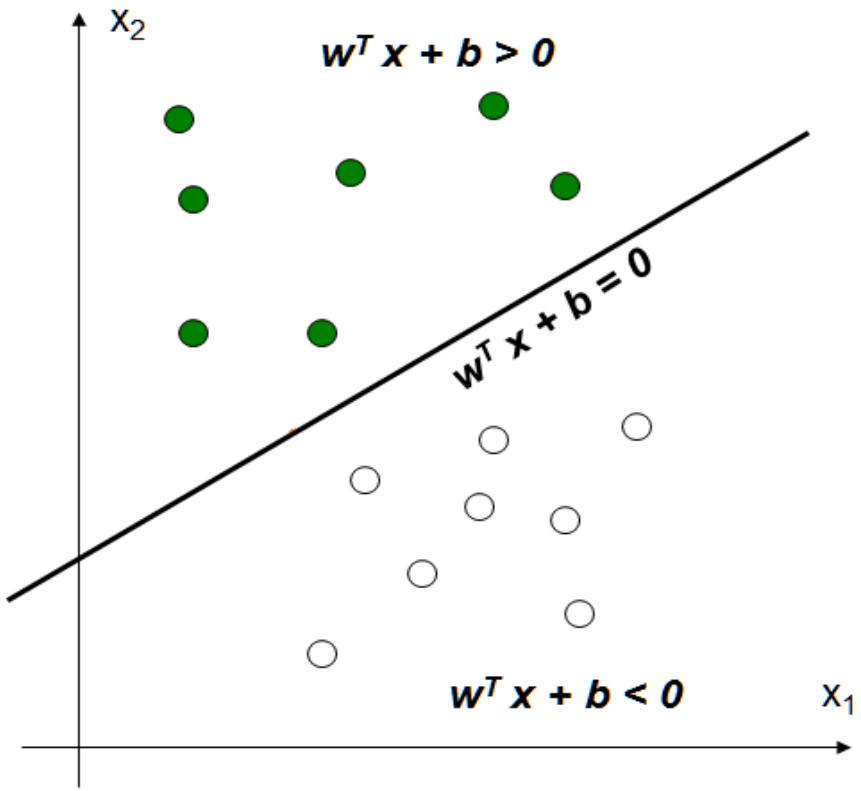
- Метод опорных векторов решает задачу классификации.
- Каждый элемент данных - точка в m–мерном пространстве $\mathbb{R}_m$.
- Формально: есть точки x_i, $i = 1, ..., m$, у точек есть метки $y_i \in \{-1, +1\}$.

Можно ли разделить данные гиперплоскостью и какая она?

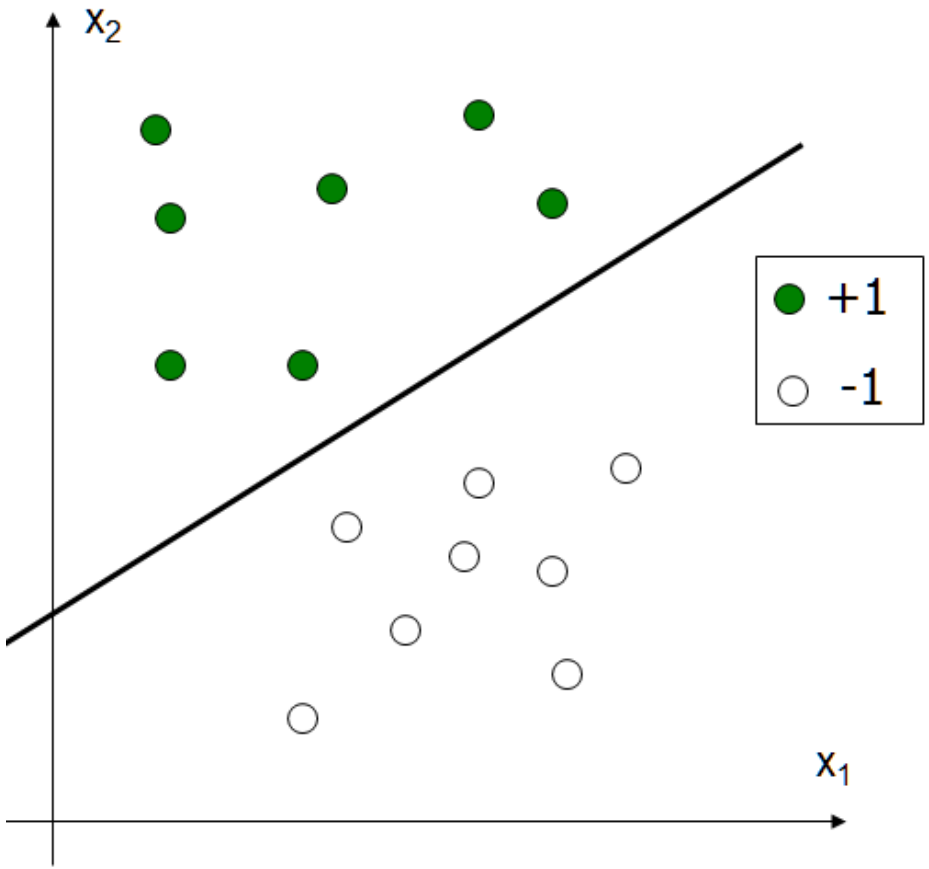
Классификация данных

$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + b$ - линейная разделяющая функция (гиперплоскость)

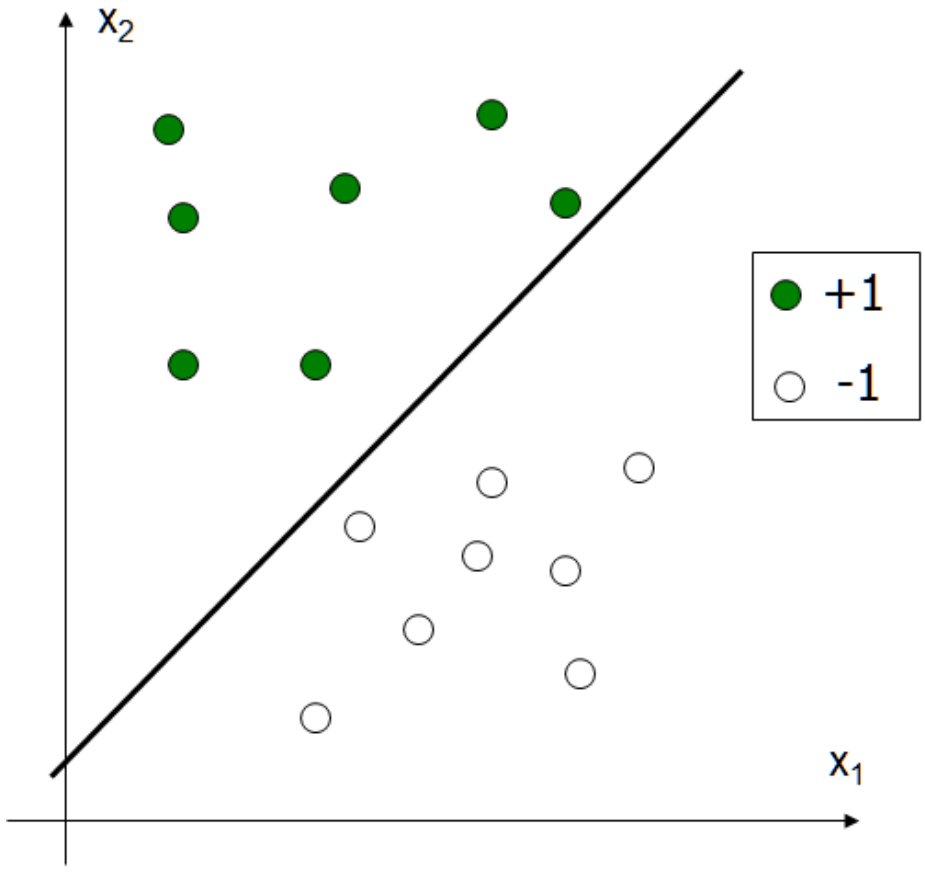
$g(x_1, ..., x_m) = \sum_{i=1}^{m} w_i x_i + b$



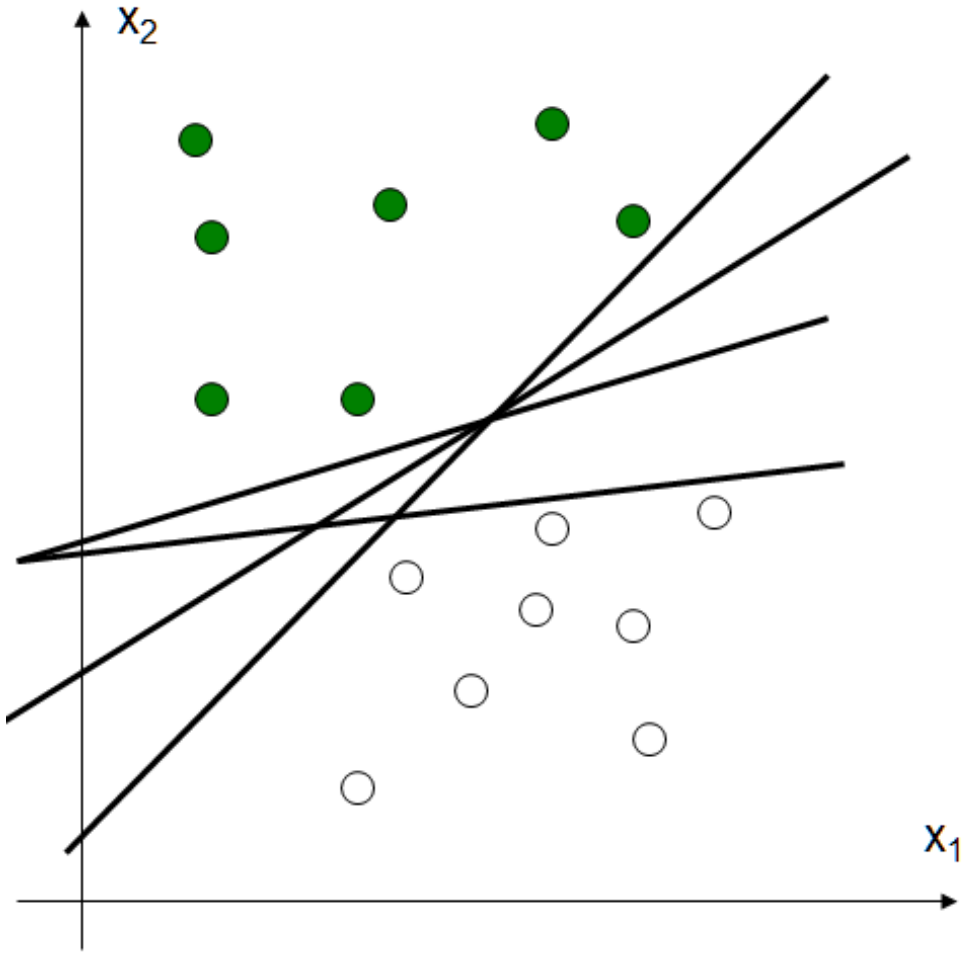
Классификация данных (один из вариантов)



Классификация данных (другой вариант)



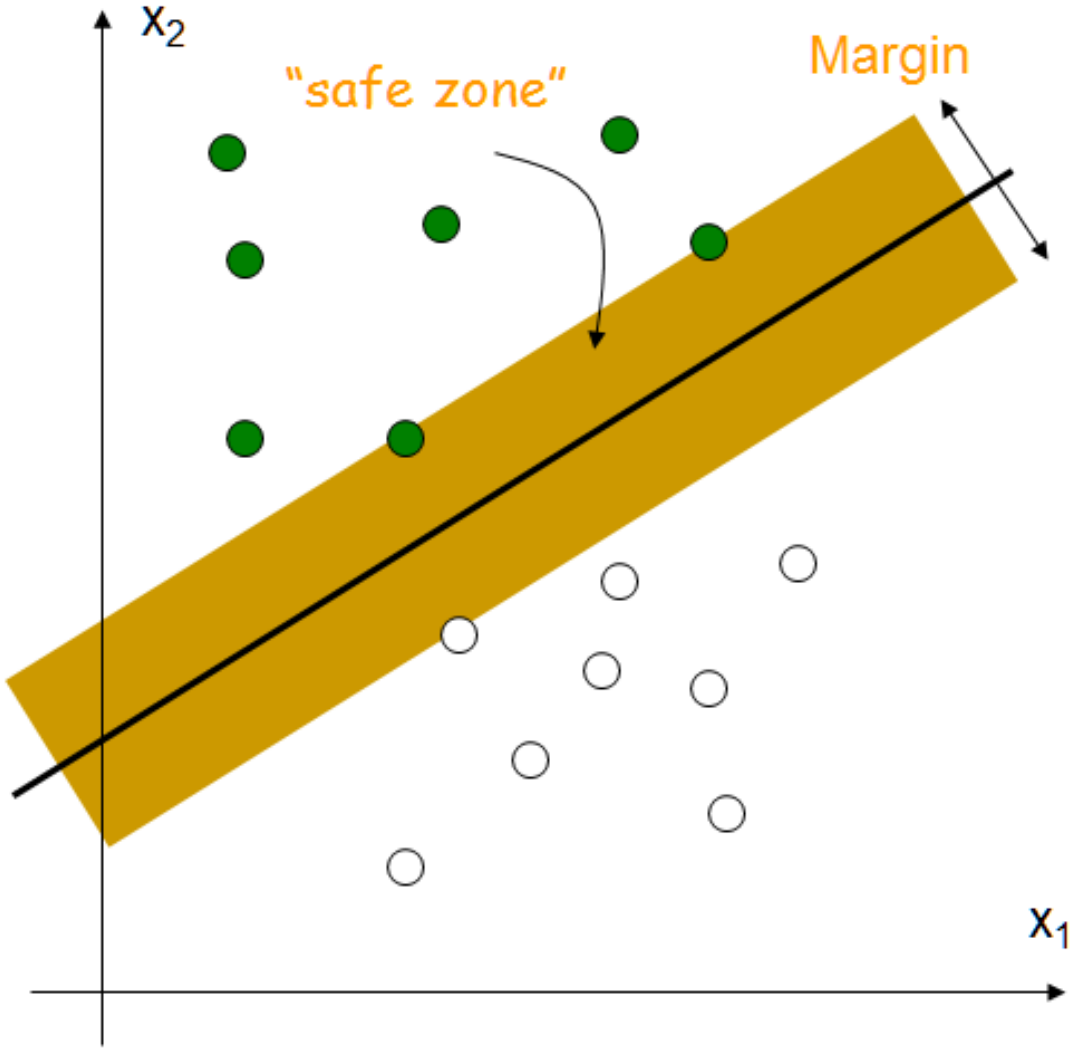
Классификация данных (еще много вариантов)



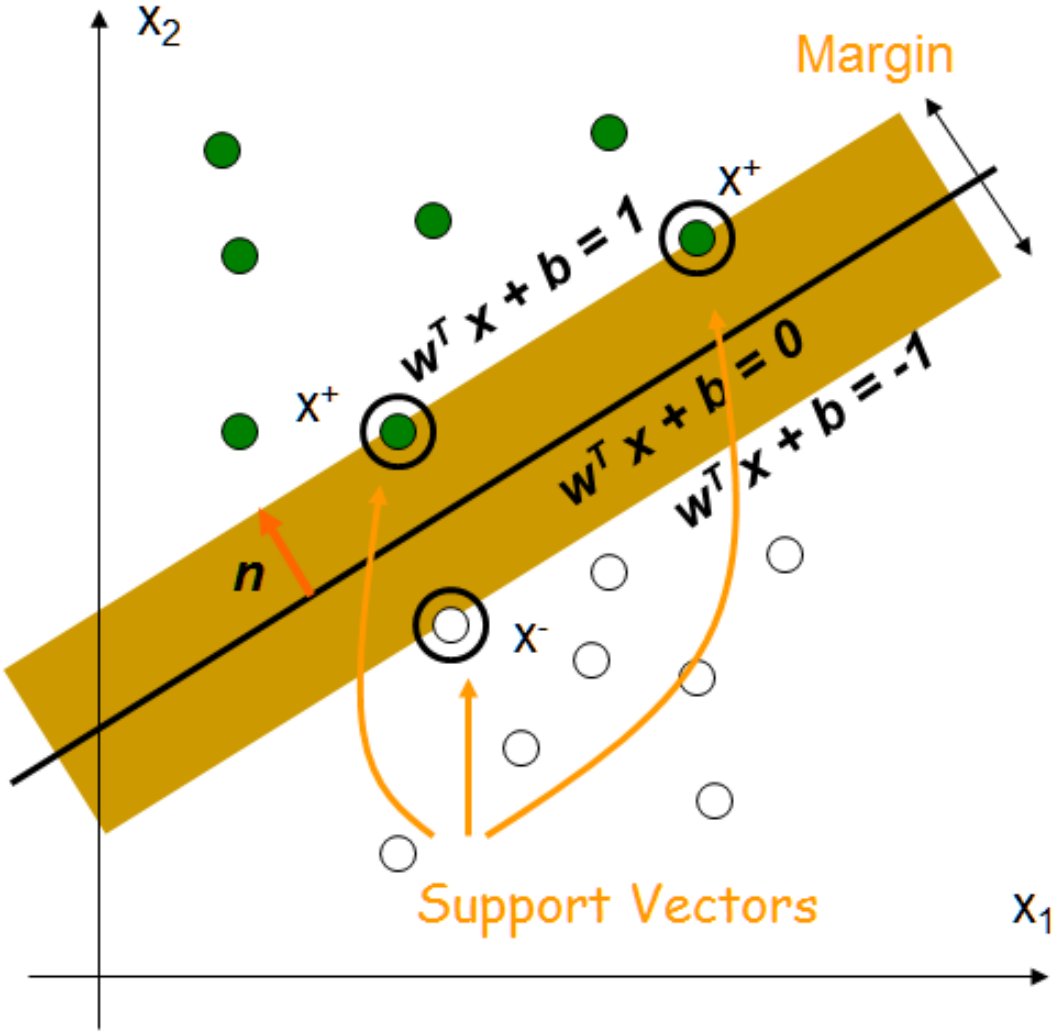
Какой вариант оптимальный?

Оптимальная разделяющая гиперплоскость — это гиперплоскость, максимизирующая ширину **разделяющей полосы** и лежащая в середине этой полосы.
Иными словами, оптимальная разделяющая гиперплоскость максимизирует **зазор** (margin) между плоскостью и данными из обучающей выборки.
Если классы линейно разделимы и каждый содержит не менее одного элемента, то оптимальная разделяющая гиперплоскость единственна.

Разделяющая полоса



Какая полоса лучше?



Как определить ширину полосы?

Без доказательства:

$$M = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{2}{w_1^2 + w_2^2 + ... + w_m^2}$$

Формулировка задачи оптимизации:

$$\frac{2}{\|\mathbf{w}\|} \to \max_{\mathbf{w}}$$

при условии:

$$\begin{aligned} \text{для } y_i = +1: &\quad \mathbf{w}^T\mathbf{x} + b \geq 1 \\ \text{для } y_i = -1: &\quad \mathbf{w}^T\mathbf{x} + b \leq -1 \end{aligned}$$

Задача оптимизации

$$\frac{\|\mathbf{w}\|}{2} = \frac{1}{2}(w_1^2 + w_2^2 + ... + w_m^2) \to \min_{\mathbf{w}}$$

при условии:

$$y_i \left(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b\right) \geq 1$$

Это задача квадратической оптимизации с линейными ограничениями!

Задача оптимизации

Функция Лагранжа:

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, \mathbf{w}, b, \alpha) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m} w_i^2 - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \left(y_i \left(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b\right) - 1\right)$$

$\alpha_i,\ i = 1, ..., n$ - множители Лагранжа.
Необходимые условия седловой точки функции Лагранжа

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = -\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_k} = w_k - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i x_i^{(k)} = 0,\ k = 1, ..., m$$

Двойственная задача

Подставляя условия седловой точки в функцию Лагранжа, получаем двойственную задачу

$$\max \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j \right)$$

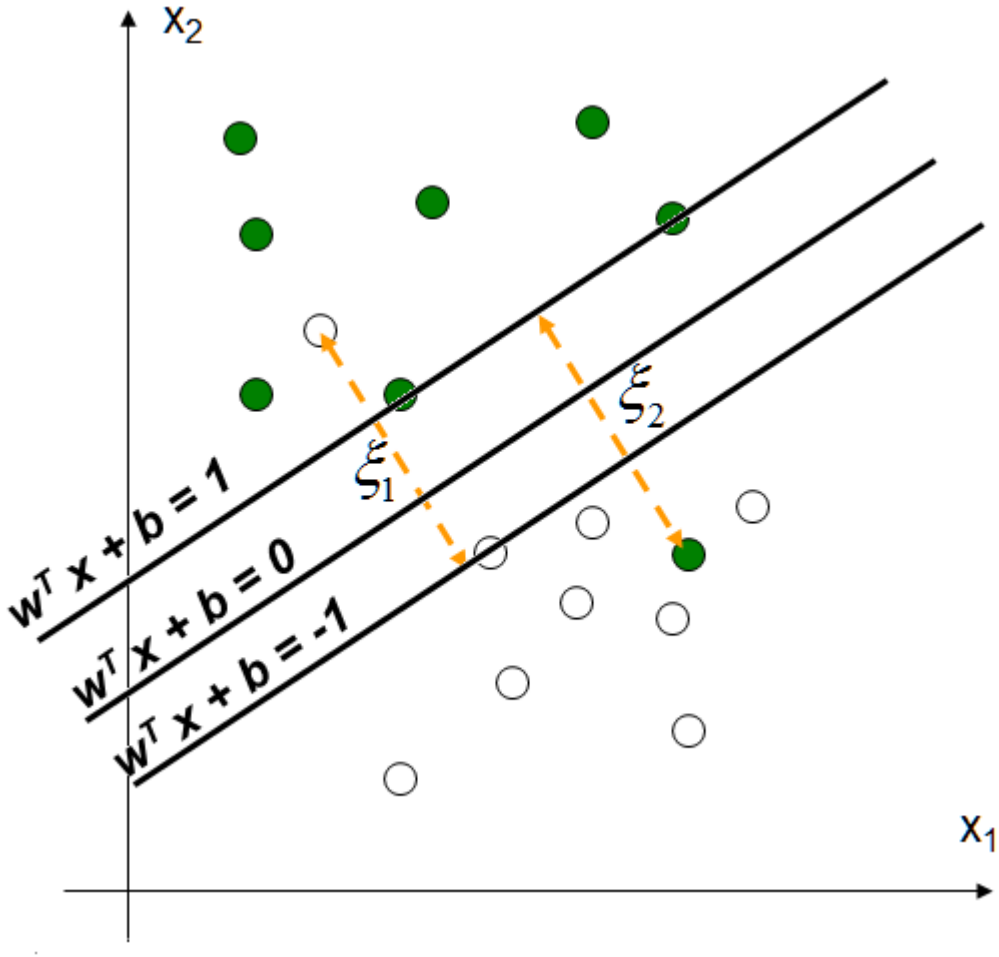
при ограничениях

$$\alpha_i \geq 0, i = 1, ..., n, \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0.$$

Разделяющая функция:

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{x} + b$$

Данные линейно не разделимы



Вспомогательные переменные ξ_i (неотрицательные ошибки) могут быть добавлены.

Переформулирование задачи оптимизации

$$\frac{\|\mathbf{w}\|}{2} = \frac{1}{2}(w_1^2 + w_2^2 + ... + w_m^2) \to \min_{\mathbf{w}}$$

при условии: $y_i \left(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b\right) \geq 1,\ i = 1, ..., n.$

$$\Downarrow$$

$$\frac{\|\mathbf{w}\|}{2} + C \sum_{i=1}^{n} \xi_i$$

при условии:

$$y_i \left(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b\right) \geq 1 - \xi_i, \quad \xi_i \geq 0,\ i = 1, ..., n.$$

C - штрафной параметр

Двойственная задача для линейно неразделимых данных

$$\max_{\alpha} \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j \right)$$

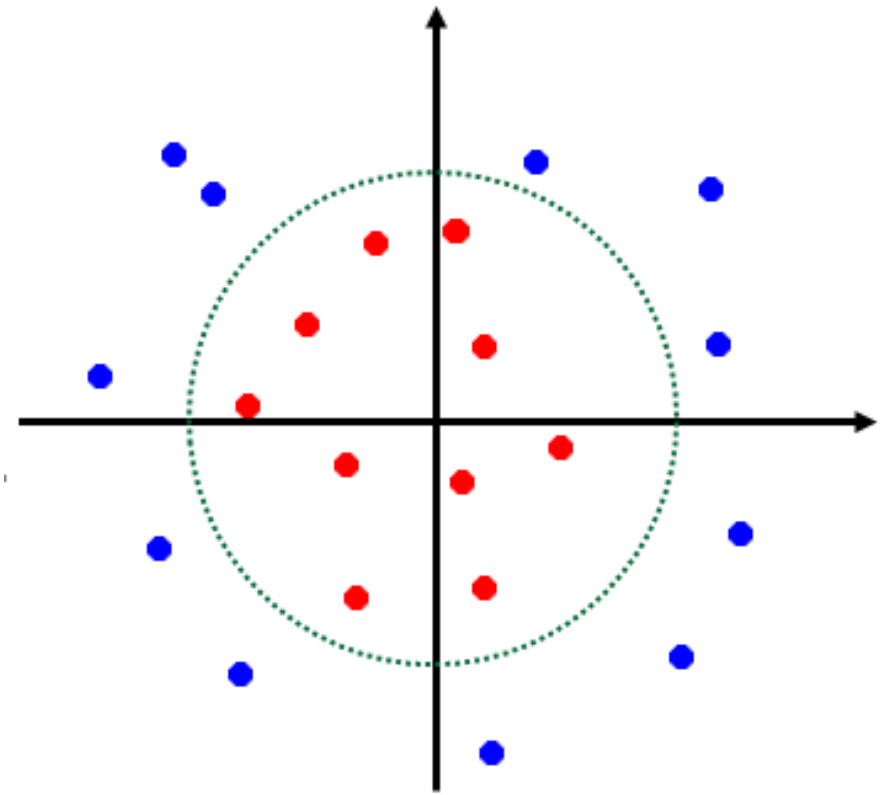
при ограничениях

$$0 \leq \alpha_i \leq C, i = 1, ..., n, \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0.$$

Разделяющая функция:

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{x} + b$$

Сложный случай

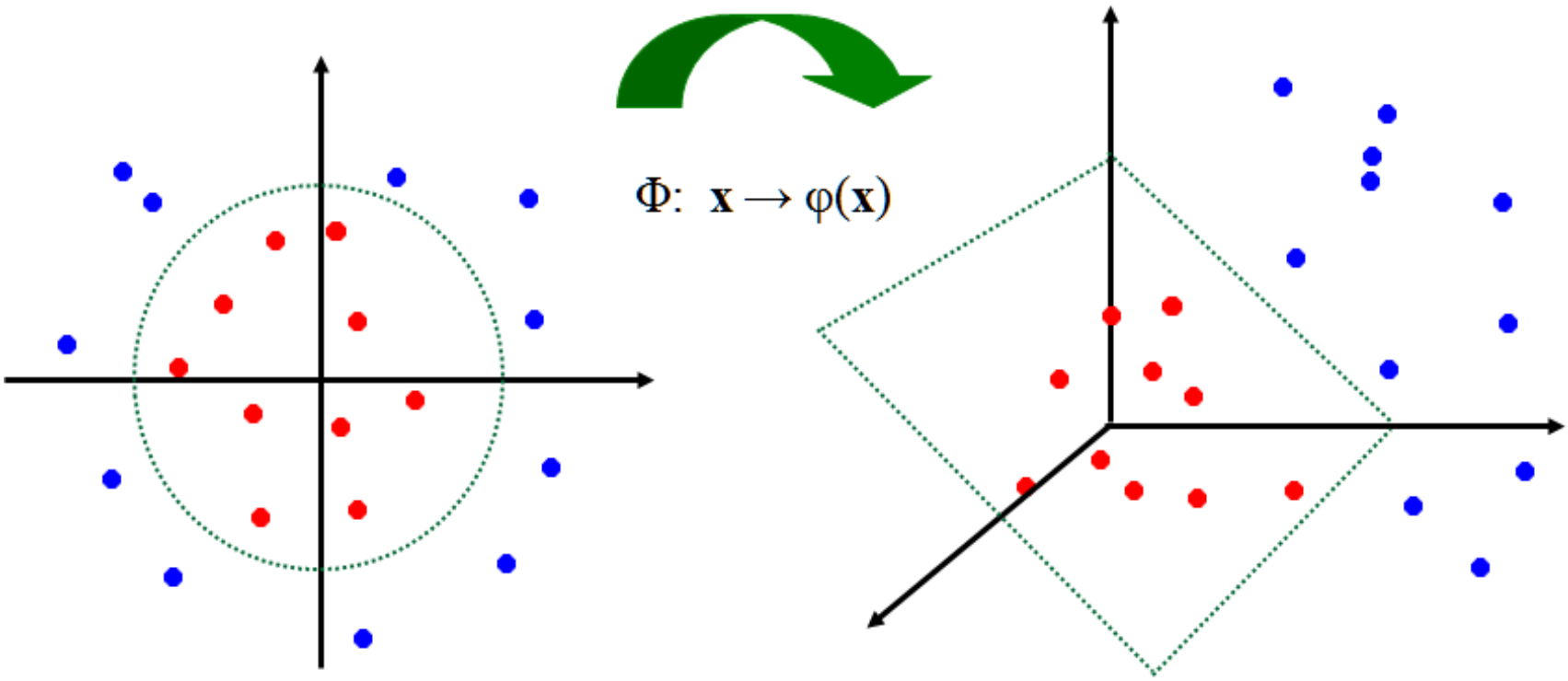


Как построить разделительную плоскость?

Ядра и спрямляющие пространства

Необходимо перейти от исходного пространства X в другое большей размерности, называемое **спрямляющим пространством**, с помощью некоторого отображения Φ.

Ядра и спрямляющие пространства



Спрямляющие пространства (пример)

- Чтобы в двумерном пространстве с координатами $(x_1,\ x_2)$ решить задачу классификации квадратичной функцией, надо перейти в пятимерное пространство:

$$(x_1,\quad x_2,\quad x_1 \cdot x_2,\quad x_1^2,\quad x_2^2)$$

- Если решить задачу линейного разделения в этом новом пространстве, тем самым решится задача квадратичного разделения в исходном.
- Отображение

$$\varphi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^5 : \varphi(x_1,\ x_2) = (x_1,\quad x_2,\quad x_1 \cdot x_2,\quad x_1^2,\quad x_2^2)$$

- Вектор в $\mathbb{R}^5$ теперь соответствует квадратичной кривой общего положения в $\mathbb{R}^2$, а функция классификации выглядит как

$$f(\mathbf{x}) = \operatorname{sign}\left(\varphi(\mathbf{w})\varphi(\mathbf{x}) - b\right)$$

Ядра и спрямляющие пространства

Разделяющая плоскость в спремляющем пространстве:

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{x} + b \rightarrow g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \varphi(\mathbf{x}_i)^T \varphi(\mathbf{x}) + b$$

Произведение $\varphi(\mathbf{x}_i)^T \varphi(\mathbf{x})$ играет необыкновенную роль. Ядро

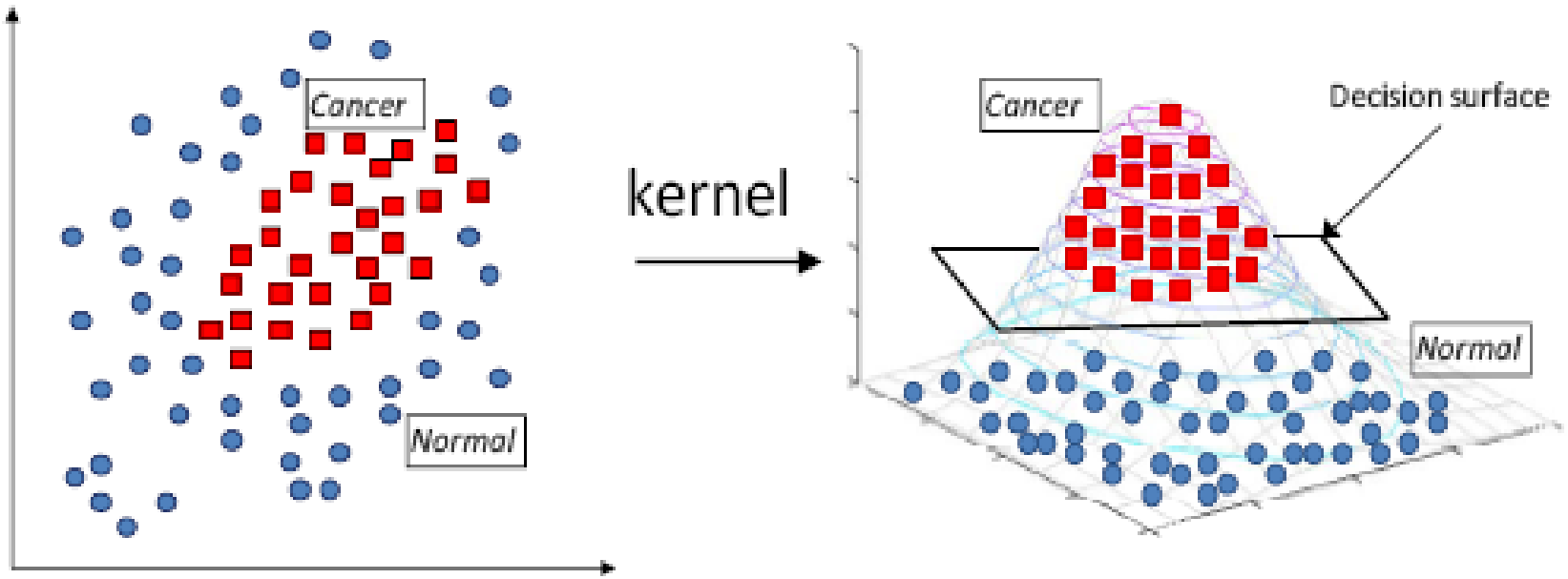
$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \varphi(\mathbf{x}_i)\varphi(\mathbf{x}_j).$$

The Kernel Trick!

Kernel Trick

- Данные отображаются в пространство большей размерности для того, чтобы сделать их линейно разделимыми.
- Так как только поточечное произведение $\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$ используется в двойственной форме SVM, то нет необходимости придумывать такое отображение $\varphi(\mathbf{x}_i)$ в явном виде. Достаточно использовать ядро $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ из определенного класса ядер.

Ядра и спрямляющие пространства



Небольшое видео

(SVMtrick1.mp4)

Типовые ядра

Примеры наиболее популярных ядер:

1. Линейное: $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$
2. Полиномиальное: $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \left(1 + \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j\right)^p$
3. Гауссово (радиальная функция):
   $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left(-\frac{\left\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\right\|^2}{2\sigma^2}\right) = \exp\left(-\frac{\sum_{k=1}^{m}(x_i^{(k)} - x_j^{(k)})^2}{2\sigma^2}\right)$
4. Сигмоидальная («нейронная») функция:
   $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \tanh\left(\beta_0 \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j + \beta_1\right)$

Двойственная задача для линейно неразделимых данных

$$\max_{\alpha} \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \right)$$

при ограничениях

$$0 \leq \alpha_i \leq C, i = 1, ..., n, \sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0.$$

Разделяющая функция:

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) + b$$

Алгоритм SVM

1. Выбрать ядро $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$
2. Выбрать значение штрафа C
3. Выбрать значение параметра ядра (σ, p, β_0,β_1)
4. Решить задачу квадратического программирования (есть много программных пакетов) и получить опорные векторы α_i
5. Построить разделяющую функцию g, используя опорные векторы
6. Проверить качество классификации, используя скользящий контроль (cross-validation)
7. Если качество не удовлетворяет, то переход к шагу 2, иначе завершение алгоритма.

Некоторые советы по выбору ядра и параметров

- Выбор ядра: Гауссово или полиномиальное
- Выбор параметра Гауссова ядра σ:
  - эвристика: σ выбирается как расстояние между ближашими точками в разных классах
  - используя скользящий контроль в общем случае

Эмпирический функционал риска и SVM

- **Эмпирический функционал риска**:

$$Q(X) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L(x_i, y_i).$$

- Функция потерь специального вида (петлевая функция - hinge-loss function):

$$L(x_i, y_i) = \max\left(0, 1 - y_i g(x_i)\right).$$

- Задача минимизации функционала риска:

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L(x_i, y_i) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \max\left(0, 1 - y_i g(x_i, \mathbf{w}, b)\right) \to \min_{b,\mathbf{w}}$$

- **Некорректная задача**: имеет бесконечное множество решений, если g нелинейная (можно провести бесконечно много кривых между точками разных классов)

Эмпирический функционал риска и слагаемое Тихонова

Регуляризационное (сглаживающее) слагаемое Тихонова:

$$\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\max(0, 1 - y_i g(x_i, \mathbf{w}, b)) \to \min_{b,\mathbf{w}}$$

Заменяем $\xi_i = \max(0, 1 - y_i g(x_i, \mathbf{w}, b))$ и вводим штраф C

$$\Downarrow$$

Задача оптимизации:

$$\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{n}\xi_i \to \min_{b,\mathbf{w}}$$

при ограничении

$$1 - y_i g(x_i, \mathbf{w}, b) \geq \xi_i, \quad \xi_i \geq 0, \ i = 1, ..., n$$

Верхняя граница ошибки

Используем метод перекрестного контроля с одним отделяемым элементом (leave-one-out cross-validation, LOO).

$$\text{ошибка LOO} \leq \frac{\text{количество опорных векторов}}{\text{количество обучающих примеров}}$$

Ключевые особенности SVM

1. Максимизирует отступ между положительными и отрицательными объектами
2. Штрафует ошибки в случае неразделимой выборки
3. Только опорные векторы определяют решение
4. Отображение объектов при помощи ядер в новое нелинейное пространство

Преимущества и недостатки SVM

- Преимущества SVM:
  - Задача выпуклого квадратичного программирования имеет единственное решение.
  - Позволяет рассматривать различные виды нелинейности, изменяя ядра или их параметры.
- Недостатки SVM:
  - Неустойчивость к шуму.
  - Нет общих подходов к оптимизации ядра под задачу.
  - Приходится подбирать параметр C.
  - Нет отбора признаков.

Программная реализация в R

- https://cran.r-project.org/web/views/MachineLearning.html
- Package ‘kernlab’: функция: **ksvm**
- Package ‘e1071’: функция: **svm**
- Package ‘wsvm’: функция: **wsvm**

см. детальное описание пакетов в A. Karatzoglou, D. Meyer, K. Hornik “Support Vector Machines in R”.

Вопросы

?