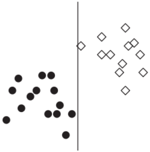
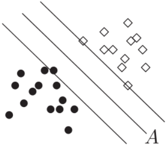
Ядерные методы

Виктор Китов
v.v.kitov@yandex.ru

Содержание

Метод опорных векторов


(a)



(b)

Метод опорных векторов

(a) (b)

Зазор

Зазор - это сумма расстояний от разделяющей гиперплоскости до множества объектов класса ω_1 и множества объектов класса ω_2 в обучающей выборке.

Основная идея

Определить линейную границу таким образом, что зазор между классами обучающей выборки был максимален.

Метод опорных векторов

Объекты x_i для $i = 1, 2, ...n$ лежат на расстоянии $b/|w|$ от разделяющей гиперплоскости

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

Это можно переписать как

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

Зазор равен $2b/|w|$. Поскольку неизвестные параметры w, w_0 и b определены с точностью до мультипликативной константы, положим $b = 1$.

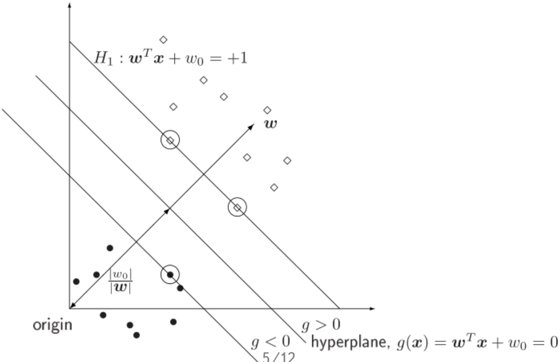
Постановка задачи

Постановка задачи:

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

Опорные вектора

Условие $\alpha_i(y_i(x_i^T w + w_0) - 1) = 0$ выполнено либо когда $\alpha_i = 0$, либо когда $y_i(x_i^T w + w_0) - 1 = 0$. Случай $\alpha_i > 0$ описывает «опорные» вектора, которые лежат на расстоянии $1/|w|$ к разделяющей гиперплоскости и влияют на оптимальные веса. Другие веса не влияют на решение.



Решение

Определим $\mathcal{SV}$ как множество индексов опорных векторов. Оптимальные α_i определяют оптимальные веса w:

$$w = \sum_{i \in \mathcal{SV}} \alpha_i y_i x_i$$

w_0 может быть найдено из условия пограничности любого опорного вектора:

$$y_i(x_i^T w + w_0) = 1,\ i \in \mathcal{SV}$$

w_0, найденное из суммы пограничных условий 6 по n_{SV} опорным векторам, будет более устойчивым:

$$n_{\mathcal{SV}} w_0 + \sum_{i \in \mathcal{SV}} x_i^T w = \sum_{i \in \mathcal{SV}} y_i$$

1. Метод опорных векторов
   - Случай линейно неразделимых классов

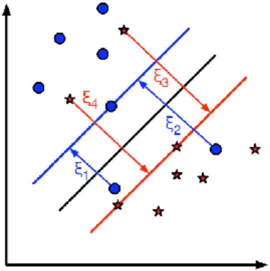
Ослабление условий оптимизации

- Пусть объекты обучающей выборки не могут быть линейно разделены на разные классы
- Оптимизационная задача модифицируется:
  - неравенства в (6) могут нарушаться на величины ξ_i
  - величины нарушений ξ_i, $i = 1, 2, ...N$ штрафуются в оптимизируемом критерии:

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

Линейно-неразделимый случай

- Новый параметр C
    - определяет цену неправильного разделения классов.
    - контролирует противоречие между простотой и точностью модели
    - выбирается на валидационном множестве
- Другие виды штрафа возможны, например $C\sum_i \xi_i^2$.



Типы обучающих объектов

- **Неинформативные объекты**:
  - для них $\alpha_i = 0$ ($\Leftrightarrow r_i = C \Leftrightarrow \xi_i = 0 \Leftrightarrow y_i(w^T x_i + w_0) \geq 1$)
- **Опорные вектора:**
  - для них $\alpha_i > 0$ ($\Leftrightarrow y_i(w^T x_i + w_0) = 1 - \xi_i$)
  - **граничные опорные вектора**:
    - имеют $\xi_i = 0$ ($\Leftrightarrow r_i > 0 \Leftrightarrow \alpha_i \in (0, C) \Leftrightarrow y(w^T x_i + w_0) = 1$), тогда опорный вектор лежит на расстоянии $1/|w|$ от разделяющей гиперплоскости.
  - **опорные вектора - «нарушители»**:
    - для них $\xi_i > 0$ ($\Leftrightarrow r_i = 0 \Leftrightarrow \alpha_i = C$), поэтому расстояние со знаком (зазор, margin) от них до разделяющей гиперплоскости меньше, чем $1/|w|$.
    - Если $\xi_i \in (0, 1)$, то опорный вектор все еще корректно классифицируется.
    - Если $\xi_i > 1$, то опорный вектор классифицируется неправильно.

Решение

Обозначим через $\mathcal{SV}$ - множество индексов опорных векторов (для которых $\alpha_i > 0 \Leftrightarrow y(w^T x_i + w_0) = 1 - \xi_i$) и $\widetilde{\mathcal{SV}}$ - множество граничных опорных векторов ($\alpha_i \in (0, C) \Leftrightarrow \xi_i = 0,\ y(w^T x_i + w_0) = 1$)

Оптимальные α_i определяют веса w:

$$w = \sum_{i \in \mathcal{SV}} \alpha_i y_i x_i$$

w_0 может быть найдено из граничного условия на любой граничный опорный вектор $\xi_i = 0$:

$$y_i(x_i^T w + w_0) = 1,\ i \in \widetilde{\mathcal{SV}} \qquad (2)$$

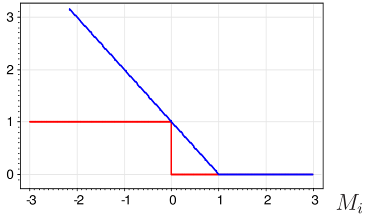
w_0, найденное из суммы (2) по всем граничным опорным векторам $i \in \widetilde{\mathcal{SV}}$ будет более устойчиво:

$$n_{\widetilde{\mathcal{SV}}} w_0 + \sum_{i \in \widetilde{\mathcal{SV}}} x_i^T w = \sum_{i \in \widetilde{\mathcal{SV}}} y_i$$

Функция цены, соответствующая методу опорных векторов

Оптимизационная задача:

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



может быть переписана как

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

Таким образом, метод опорных векторов - это линейный классификатор с функцией цены $\mathcal{L}(M) = [1 - M]_+$ и L_2-регуляризацией.