Метод опорных векторов

Сергей Николенко

Samsung AI Center — Москва

27 апреля 2020 г.

Random facts:

- 27 апреля 1578 г. по три миньона и гизара сошлись в парке Турнель; впрочем, гизарами были только два, дуэль была из-за дамы, а секунданты драться никак не должны были
- 27 апреля 1865 г. на Миссисипи произошло крупнейшее в истории речного транспорта кораблекрушение: затонувшая *Sultana* утащила с собой 1653 человека
- 27 апреля 1953 г. в рамках Operation Moolah ВВС США предложили $50,000 любому советскому пилоту, дезертировавшему в Южную Корею на МиГ-15 в рабочем состоянии; первый такой пилот получил бы $100,000.
- 27 апреля 1975 г. Лелла Ломбарди стала первой и единственной женщиной, набравшей очки в зачёт чемпионата мира Формулы-1
- 27 апреля 1986 г. всего за три часа были эвакуированы все 40 тысяч жителей Припяти
- 27 апреля 1521 г. в битве с войсками Силапулапу, одного из вождей острова Мактан, погиб Фернан Магеллан

SVM и задача линейной классификации

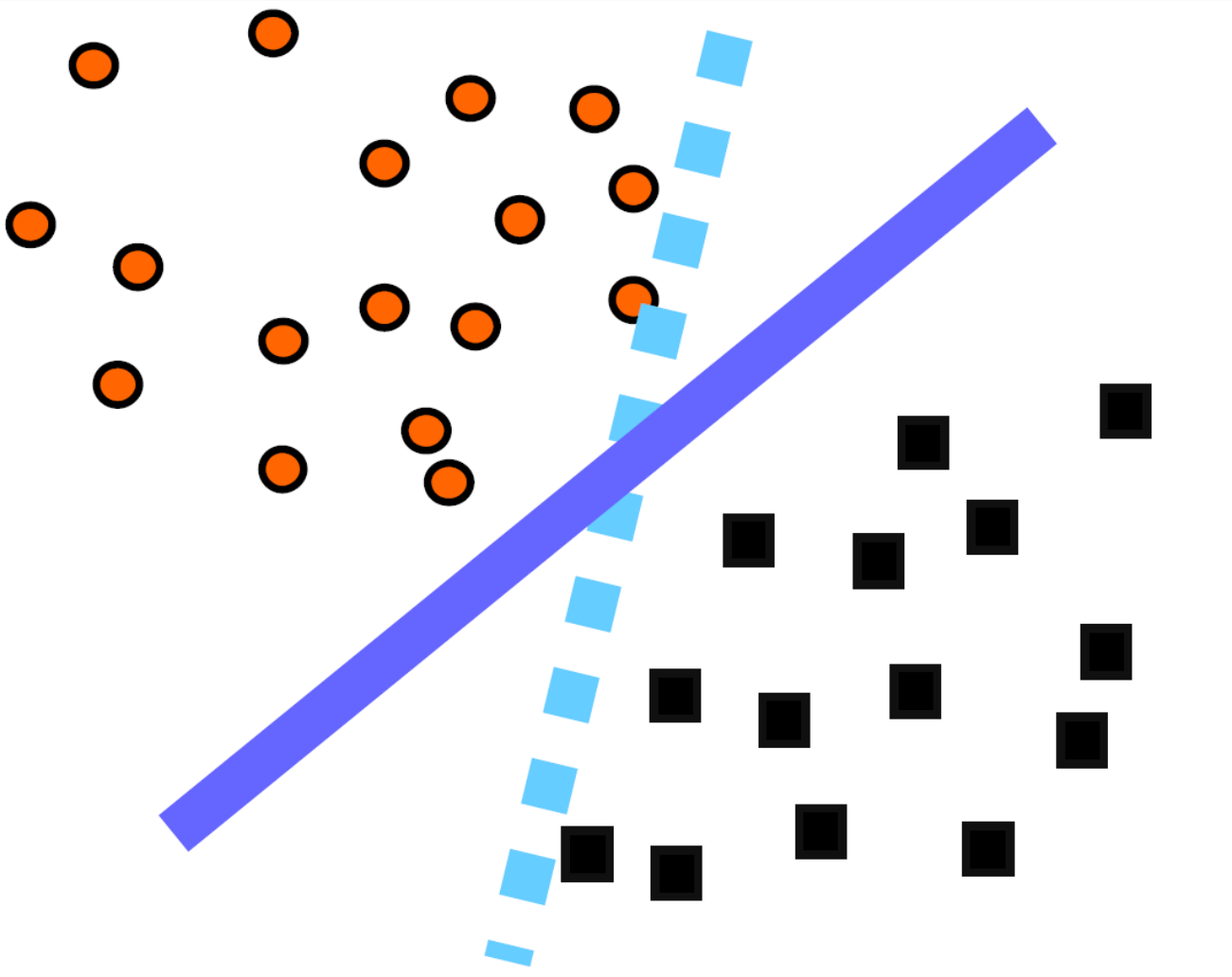
Постановка задачи

- Метод опорных векторов решает задачу классификации.
- Каждый элемент данных — точка в n–мерном пространстве $\mathbb{R}^n$.
- Формально: есть точки x_i, $i = 1..m$, у точек есть метки $y_i = \pm 1$.
- Мы интересуемся: можно ли разделить данные $(n-1)$–мерной гиперплоскостью, а также хотим найти эту гиперплоскость.
- Это всё?

Постановка задачи

- Нет, ещё хочется научиться разделять этой гиперплоскостью *как можно лучше*.
- То есть желательно, чтобы два разделённых класса лежали как можно дальше от гиперплоскости.
- Практическое соображение: тогда от небольших возмущений в гиперплоскости ничего не испортится.

Пример



Выпуклые оболочки

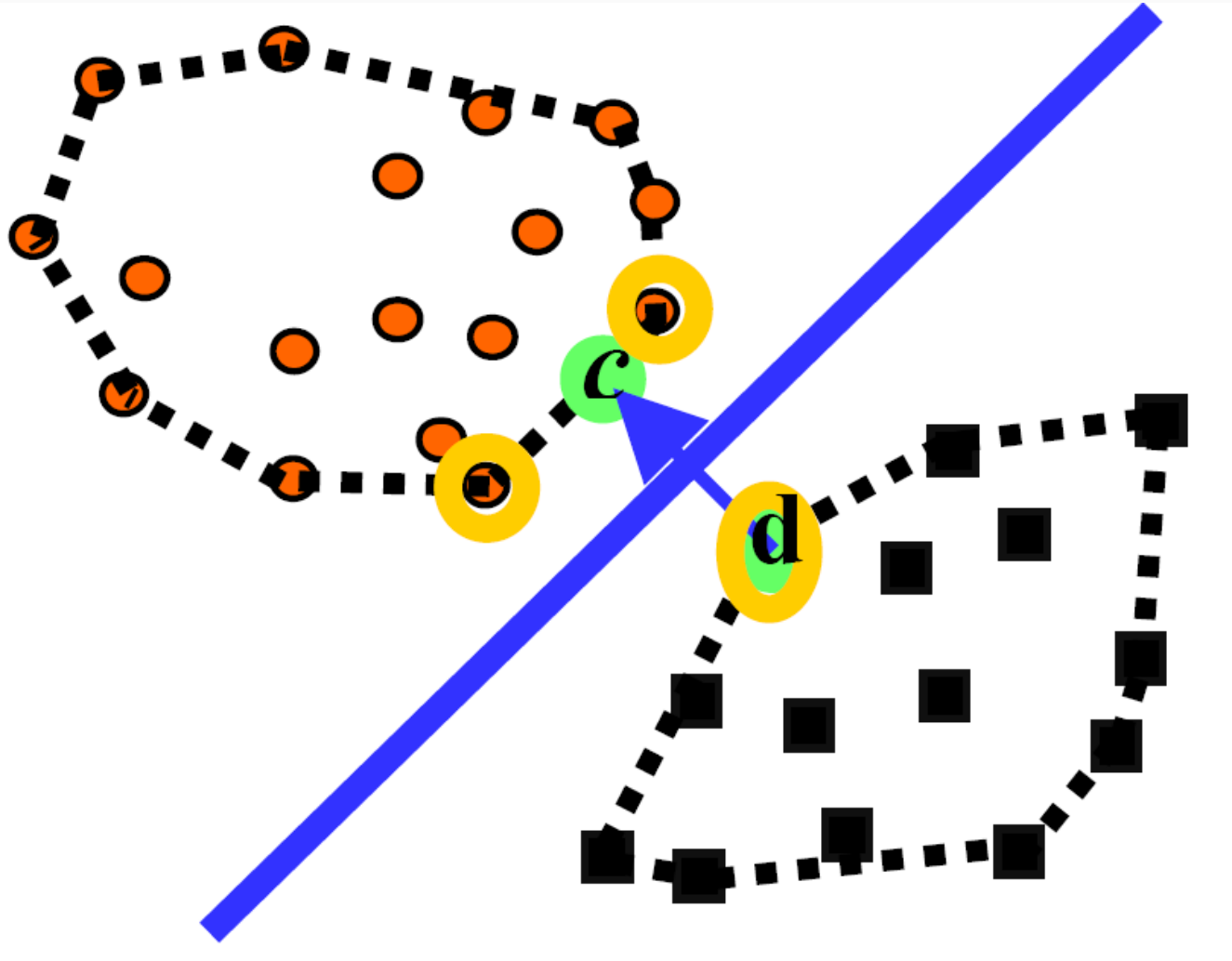
- Один подход: найти две ближайшие точки в выпуклых оболочках данных, а затем провести разделяющую гиперплоскость через середину отрезка.
- Формально это превращается в задачу квадратичной оптимизации:

$$\min_{\alpha} \left\{ ||c - d||^2, \text{ где } c = \sum_{y_i=1} \alpha_i x_i, d = \sum_{y_i=-1} \alpha_i x_i \right\}$$

$$\text{при условии } \sum_{y_i=1} \alpha_i = \sum_{y_i=-1} \alpha_i = 1, \alpha_i \geq 0.$$

- Эту задачу можно решать общими оптимизационными алгоритмами.

Пример



Максимизация зазора

- Другой подход: максимизировать *зазор* (margin) между двумя параллельными опорными плоскостями, затем провести им параллельную на равных расстояниях от них.
- Гиперплоскость называется *опорной* для множества точек X, если все точки из X лежат под одну сторону от этой гиперплоскости.
- Формально: расстояние от точки до гиперплоскости $y(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \mathbf{x} + w_0 = 0$ равно $\frac{|y(\mathbf{x})|}{\|\mathbf{w}\|}$.

Максимизация зазора

- Расстояние от точки до гиперплоскости $y(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \mathbf{x} + w_0 = 0$ равно $\frac{|y(\mathbf{x})|}{\|\mathbf{w}\|}$.
- Все точки классифицированы правильно: $t_n y(\mathbf{x}_n) > 0$ ($t_n \in \{-1, 1\}$).
- И мы хотим найти

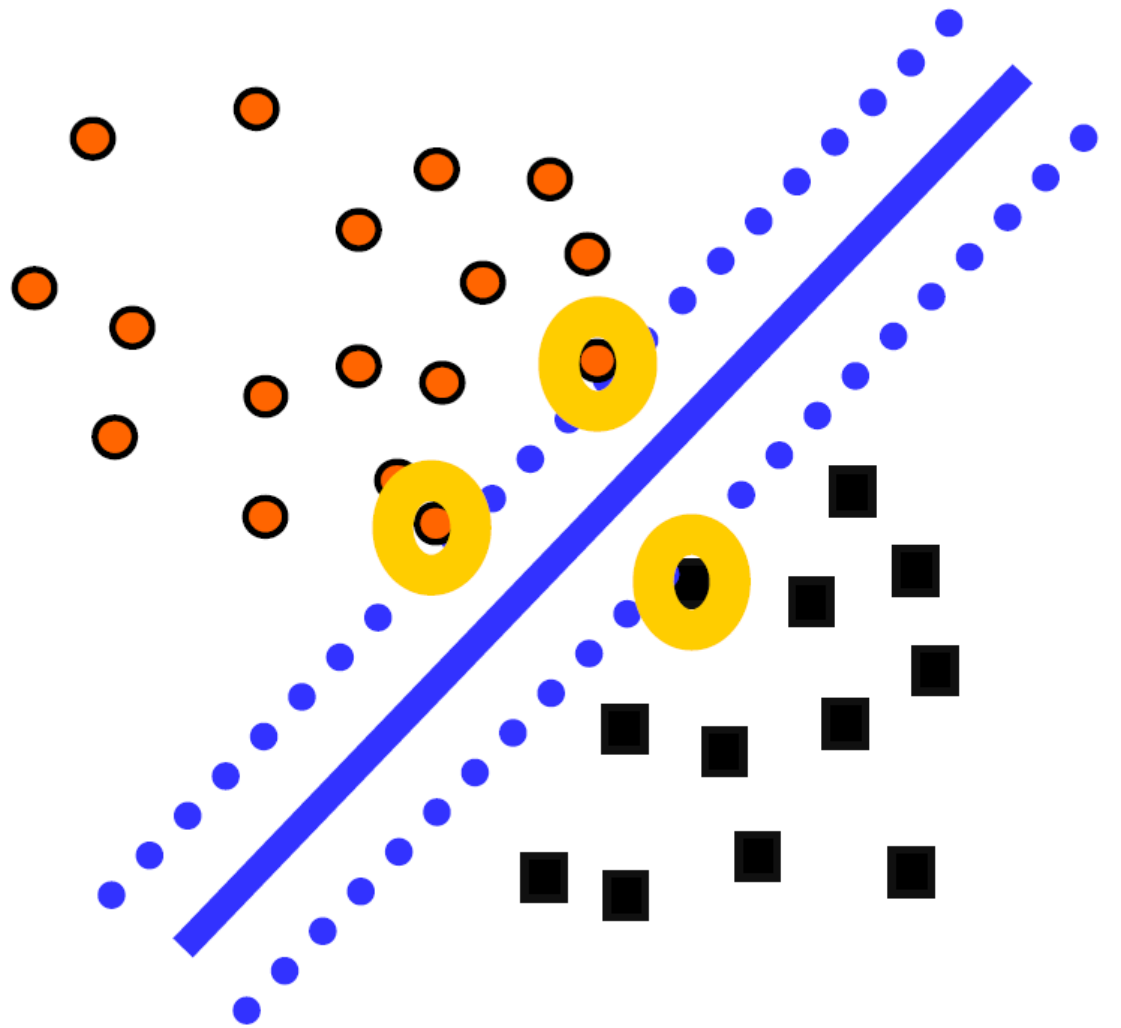
$$\arg\max_{\mathbf{w}, w_0} \min_n \frac{t_n y(\mathbf{x}_n)}{\|\mathbf{w}\|} =$$

$$= \arg\max_{\mathbf{w}, w_0} \left\{ \frac{1}{\|\mathbf{w}\|} \min_n \left[t_n (\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_n + w_0) \right] \right\}.$$

Максимизация зазора

- $\arg\max_{\mathbf{w},w_0} \left\{ \frac{1}{\|\mathbf{w}\|} \min_n \left[t_n(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_n + w_0) \right] \right\}$. Сложно.
- Но если перенормировать $\mathbf{w}$, гиперплоскость не изменится.
- Давайте перенормируем так, чтобы $\min_n \left[t_n(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_n + w_0) \right] = 1$.

Пример



Максимизация зазора

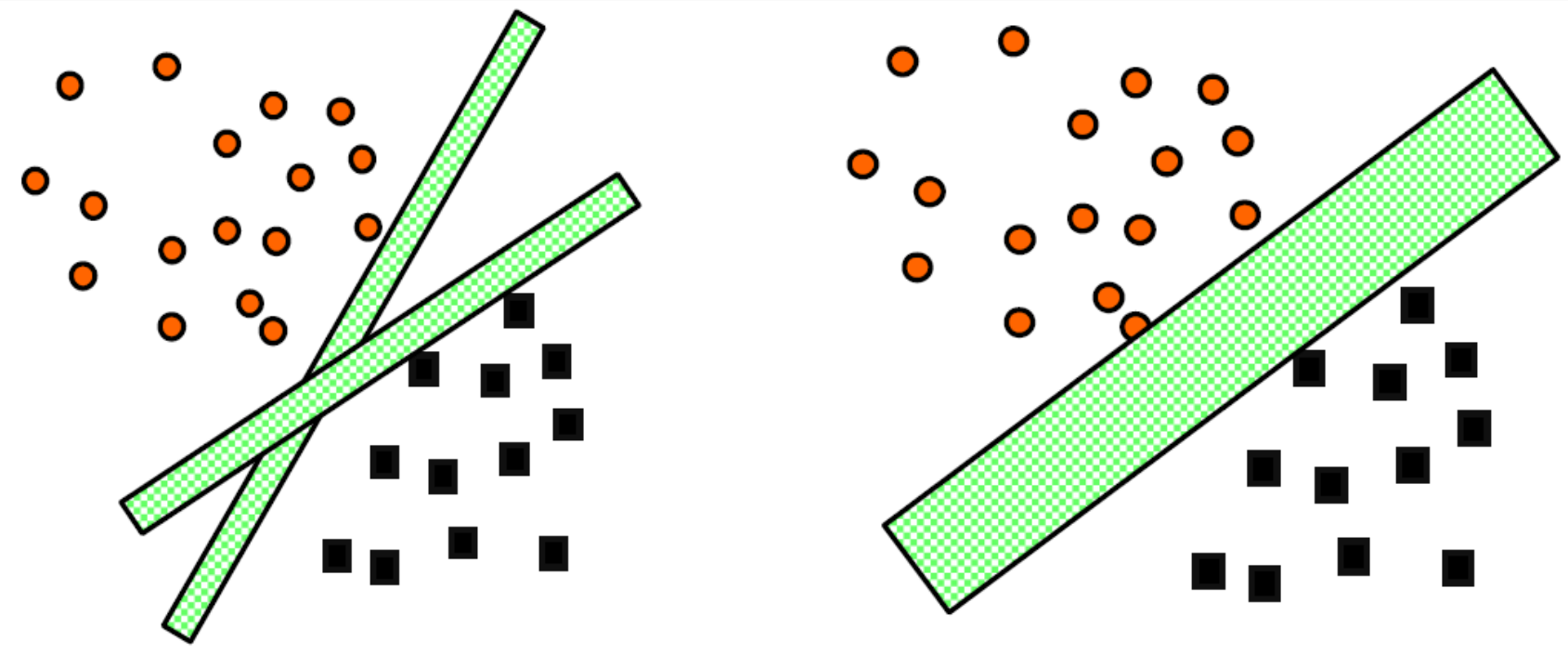
- Получается тоже задача квадратичного программирования:

$$\min_{\mathbf{w},b} \left\{ \frac{1}{2} ||\mathbf{w}||^2 \right\} \text{ при условии } t_n(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_n + w_0) \geq 1.$$

Результаты

- Результаты получаются хорошие. Такой подход позволяет находить *устойчивые* решения, что во многом решает проблемы с оверфиттингом и позволяет лучше предсказывать дальнейшую классификацию.
- В каком-то смысле в решениях с «толстыми» гиперплоскостями между данными содержится больше информации, чем в «тонких», потому что «толстых» меньше.
- Это всё можно сформулировать и доказать (позже).

Пример



Дуальные задачи

- Напомним, что такое дуальные задачи.
- Прямая задача оптимизации:

$$\min \{f(x)\} \text{ при условии } h(x) = 0,\ g(x) \leq 0,\ x \in X.$$

- Для дуальной задачи вводим параметры λ, соответствующие равенствам, и μ, соответствующие неравенствам.

Дуальные задачи

- Прямая задача оптимизации:

$$\min \{f(x)\} \text{ при условии } h(x) = 0,\ g(x) \leq 0,\ x \in X.$$

- Дуальная задача оптимизации:

$$\min \{\phi(\lambda, \mu)\} \text{ при условии } \mu \geq 0,$$
$$\text{где } \phi(\lambda, \mu) = \inf_{x \in X} \left\{ f(x) + \lambda^\top h(x) + \mu^\top g(x) \right\}.$$

Дуальные задачи

- Тогда, если $(\bar{\lambda}, \bar{\mu})$ – допустимое решение дуальной задачи, а $\bar{x}$ – допустимое решение прямой, то

$$\phi(\bar{\lambda}, \bar{\mu}) = \inf_{x \in X} \left\{ f(x) + \bar{\lambda}^\top h(x) + \bar{\mu}^\top g(x) \right\} \leq$$

$$\leq f(\bar{x}) + \bar{\lambda}^\top h(\bar{x}) + \bar{\mu}^\top g(\bar{x}) \leq f(\bar{x}).$$

- Это называется *слабой дуальностью* (только $\leq$), но во многих случаях достигается и равенство.

Дуальные задачи

- Для линейного программирования прямая задача:

$$\min c^\top x \text{ при условии } Ax = b,\ x \in X = \{x \leq 0\}.$$

- Тогда дуальная задача получается так:

$$\begin{aligned}\phi(\lambda) &= \inf_{x \geq 0} \left\{c^\top x + \lambda^\top (b - Ax)\right\} = \\ &= \lambda^\top b + \inf_{x \geq 0} \left\{(c^\top - \lambda^\top A)x\right\} = \\ &= \begin{cases} \lambda^\top b, & \text{если } c^\top - \lambda^\top A \geq 0, \\ -\infty & \text{в противном случае.} \end{cases}\end{aligned}$$

Дуальные задачи

- Для линейного программирования прямая задача:

$$\min\left\{c^\top x\right\} \text{ при условии } Ax = b,\ x \in X = \{x \leq 0\}.$$

- Дуальная задача:

$$\max\left\{b^\top \lambda\right\} \text{ при условии } A^\top \lambda \leq c,\ \lambda \text{ не ограничены.}$$

Дуальные задачи

- Для квадратичного программирования прямая задача:

$$\min \left\{ \frac{1}{2} x^\top Q x + c^\top x \right\} \text{ при условии } Ax \leq b,$$

где Q – положительно полуопределённая матрица (т.е. $x^\top Q x \geq 0$ всегда).

- Дуальная задача (проверьте):

$$\max \left\{ \frac{1}{2} \mu^\top D \mu + \mu^\top d - \frac{1}{2} c^\top Q^{-1} c \right\} \text{ при условии } c \geq 0,$$

где $D = -AQ^{-1}A^\top$ (отрицательно определённая матрица), $d = -b - AQ^{-1}c$.

Дуальная задача к SVM

- В случае SVM надо ввести множители Лагранжа:

$$L(\mathbf{w}, w_0, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 - \sum_n \alpha_n \left[t_n(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_n + w_0) - 1\right], \quad \alpha_n \geq 0.$$

- Берём производные по $\mathbf{w}$ и w_0, приравниваем нулю, получаем

$$\mathbf{w} = \sum_n \alpha_n t_n \mathbf{x}_n,$$
$$0 = \sum_n \alpha_n t_n.$$

Дуальная задача к SVM

- Подставляя в $L(\mathbf{w}, w_0, \boldsymbol{\alpha})$, получим

$$L(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_n \alpha_n - \frac{1}{2} \sum_n \sum_m \alpha_n \alpha_m t_n t_m \left(\mathbf{x}_n^\top \mathbf{x}_m\right)$$

$$\text{при условии } \alpha_n \geq 0, \sum_n \alpha_n t_n = 0.$$

- Это дуальная задача, которая обычно в SVM и используется.

Предсказание и ККТ

- А для предсказания потом надо посмотреть на знак $y(\mathbf{x})$:

$$y(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n t_n \mathbf{x}^\top \mathbf{x}_n + w_0.$$

- Получилось, что предсказания зависят от всех точек $\mathbf{x}_n$...

Предсказание и ККТ

- ...но нет. :) Условия ККТ (Karush–Kuhn–Tucker):

$$\begin{aligned} \alpha_n &\geq 0, \\ t_n y(\mathbf{x}_n) - 1 &\geq 0, \\ \alpha_n \left(t_n y(\mathbf{x}_n) - 1\right) &= 0. \end{aligned}$$

- Т.е. реально предсказание зависит от небольшого числа *опорных* векторов, для которых $t_n y(\mathbf{x}_n) = 1$ (они находятся собственно на границе разделяющей поверхности).

Постановка задачи

- Все эти методы работают, когда данные действительно линейно разделимы.
- А что делать, когда их всё-таки немножко не получается разделить?
- Первый вопрос: что делать для первого метода, метода выпуклых оболочек?

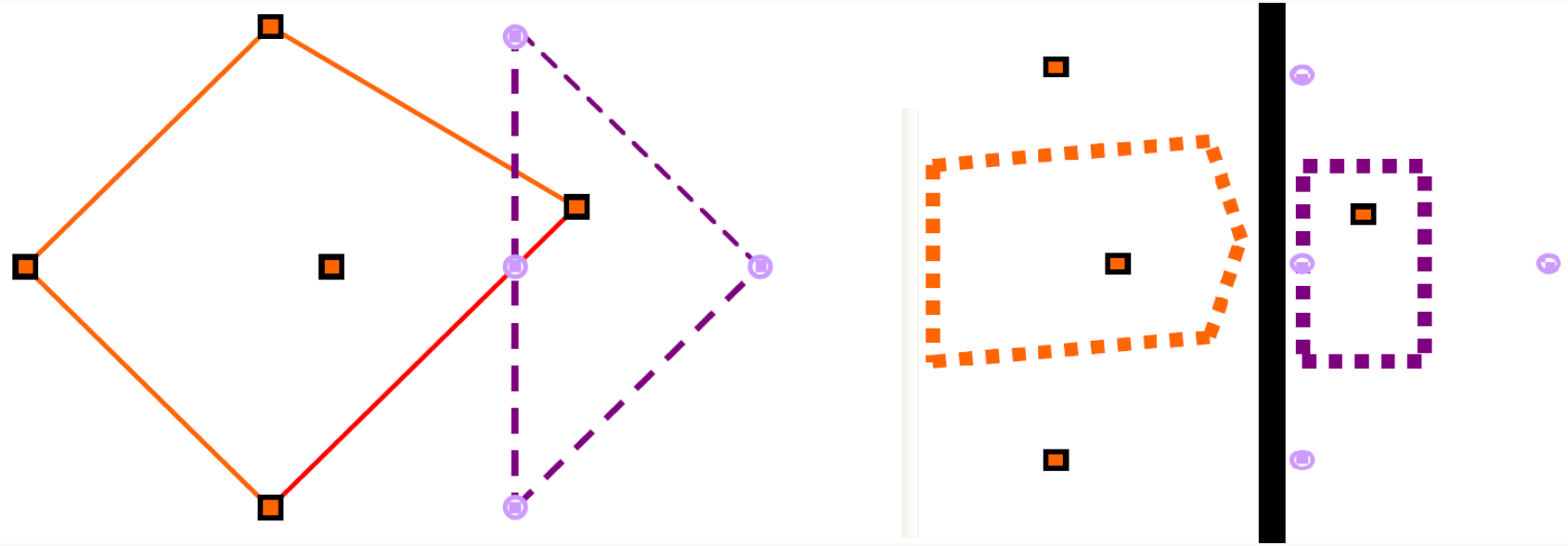
Редуцированные выпуклые оболочки

- Вместо обычных выпуклых оболочек можно рассматривать *редуцированные* (reduced), у которых коэффициенты ограничены не 1, а сильнее:

$$c = \sum_{y_i=1} \alpha_i x_i, \quad 0 \leq \alpha_i \leq D.$$

- Тогда для достаточно малых D редуцированные выпуклые оболочки не будут пересекаться.
- И мы будем искать оптимальную гиперплоскость между редуцированными выпуклыми оболочками.

Пример



Для метода опорных векторов

- Естественно, для метода опорных векторов тоже надо что-то изменить. Что?

Для метода опорных векторов

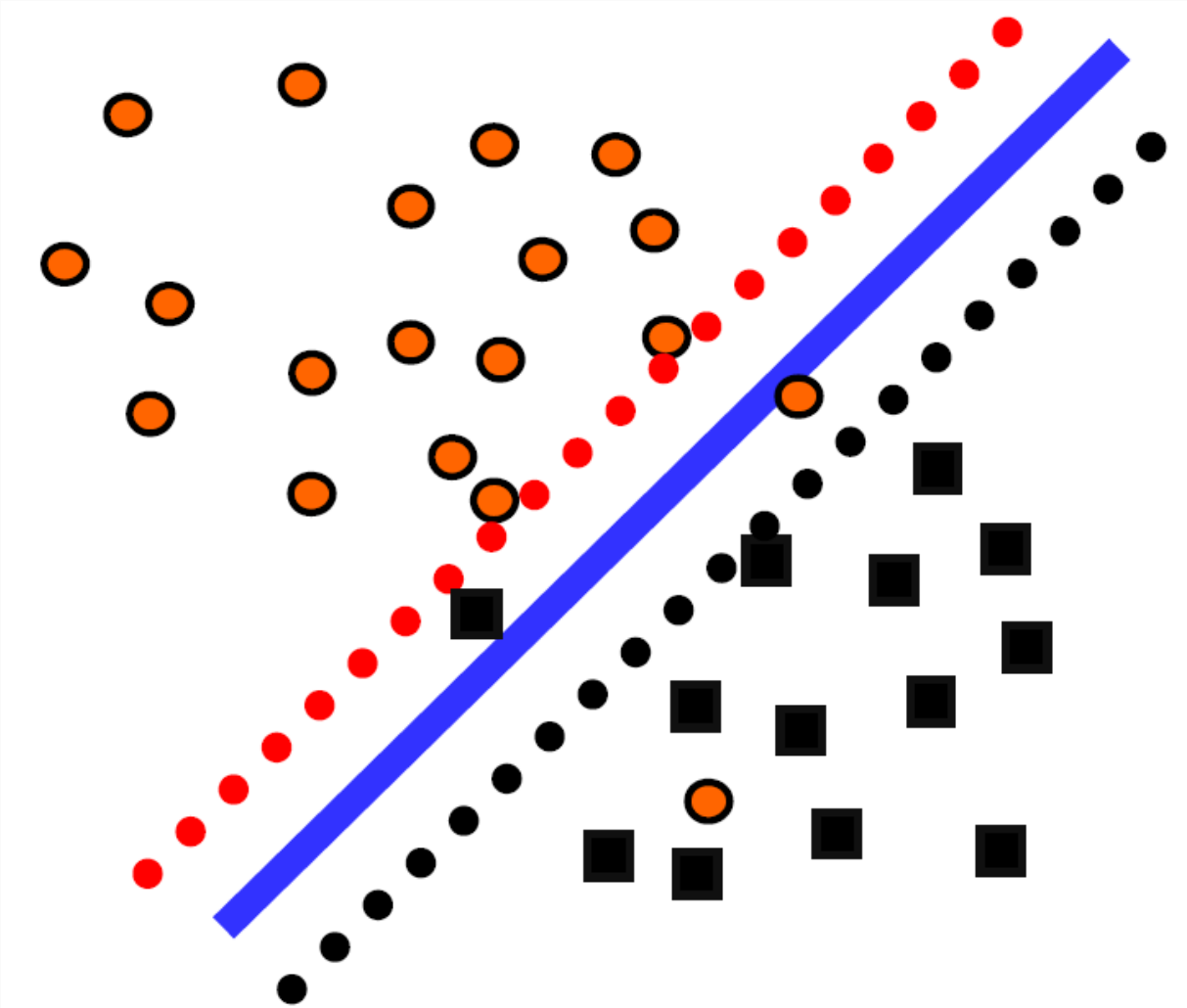
- Естественно, для метода опорных векторов тоже надо что-то изменить. Что?
- Мы просто добавим в оптимизирующуюся функцию неотрицательную ошибку (slack):

$$\min_{\mathbf{w}, w_0} \left\{ ||\mathbf{w}||^2 + C \sum_{i=1}^{m} z_i \right\}$$

при условии $t_i(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i - w_0) + z_i \geq 1$.

- Это прямая задача...

Пример



Дуальная переформулировка

- ...а вот дуальная:

$$\min_{\alpha} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} t_i t_j \alpha_i \alpha_j \left(\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j \right) - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i, \right.$$
$$\left. \text{где } \sum_{i=1}^{m} t_i \alpha_i = 0, \quad 0 \leq \alpha_i \leq C. \right\}$$

- Эта формулировка чаще всего используется в теории SVM.
- Единственное отличие от линейно разделимого случая – верхняя граница C на α_j, т.е. на влияние каждой точки.

Итого

- Метод опорных векторов отлично подходит для линейной классификации.
- Решая задачу квадратичного программирования, мы получаем параметры оптимальной гиперплоскости.
- Точно так же, как и в дуальном случае, если бы мы просто искали середину между выпуклыми оболочками.

SVM и эмпирический риск

- Ещё один взгляд на SVM — какая вообще задача у любой классификации?
- Мы хотим минимизировать эмпирический риск, то есть число неправильных ответов:

$$\sum_n [y_i \neq t_i] \to \min_{\mathbf{w}}.$$

- И если функция линейная с параметрами $\mathbf{w}$, w_0, то это эквивалентно

$$\sum_n \left[t_i \left(\mathbf{x}_n^\top \mathbf{w} - w_0\right) < 0\right] \to \min_{\mathbf{w}}.$$

- Величину $M_i = \mathbf{x}_n^\top \mathbf{w} - w_0$ назовём *отступом* (margin).
- Оптимизировать напрямую сложно...

SVM и эмпирический риск

- ...поэтому заменим на оценку сверху:

$$\sum_n [M_i < 0] \leq \sum_n (1 - M_i) \to \min_{\mathbf{w}}.$$

- А потом ещё добавим регуляризатор для стабильности:

$$\sum_n [M_i < 0] \leq \sum_n (1 - M_i) + \frac{1}{2C}\|\mathbf{w}\|^2 \to \min_{\mathbf{w}}.$$

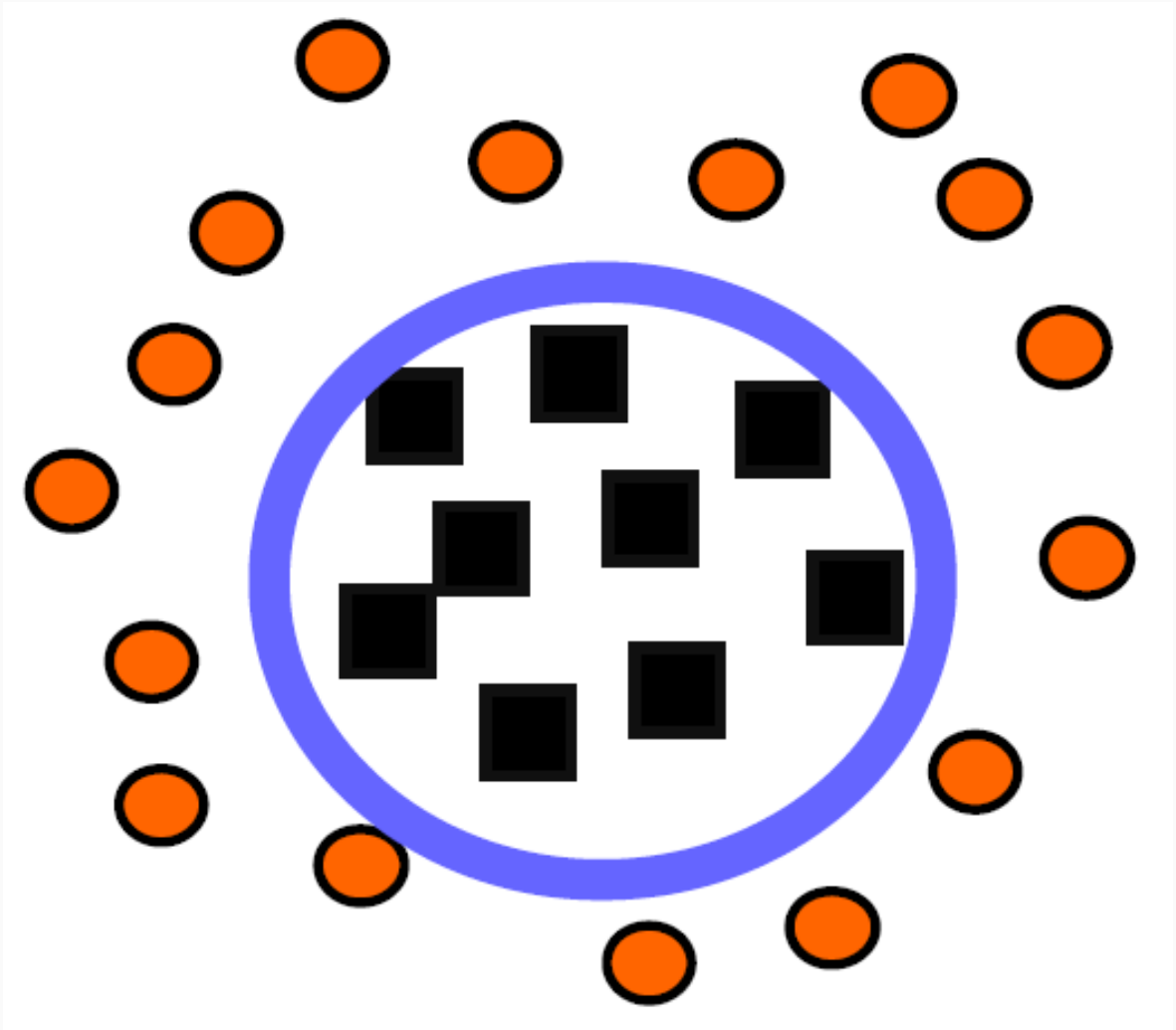
- И это снова получилась задача SVM!

SVM и разделение нелинейными функциями

Введение

- Часто бывает нужно разделять данные не только линейными функциями.
- Что делать в таком случае?

Пример



Введение

- Часто бывает нужно разделять данные не только линейными функциями.
- Классический метод: развернуть нелинейную классификацию в пространство большей размерности (feature space), а там запустить линейный классификатор.
- Для этого просто нужно для каждого монома нужной степени ввести новую переменную.

Пример

- Чтобы в двумерном пространстве $[r, s]$ решить задачу классификации квадратичной функцией, надо перейти в пятимерное пространство:

$$[r, s] \longrightarrow [r, s, rs, r^2, s^2].$$

- Или формальнее; определим $\theta : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^5$: $\theta(r, s) = (r, s, rs, r^2, s^2)$. Вектор в $\mathbb{R}^5$ теперь соответствует квадратичной кривой общего положения в $\mathbb{R}^2$, а функция классификации выглядит как

$$f(\mathbf{x}) = \operatorname{sign}(\theta(\mathbf{w}) \cdot \theta(\mathbf{x}) - b).$$

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

Проблемы с классическим подходом

- Во-первых, количество переменных растёт экспоненциально.
- Во-вторых, по большому счёту теряются преимущества того, что гиперплоскость именно оптимальная; например, оверфиттинг опять становится проблемой.
- Важное замечание: *концептуально* мы задачу уже решили. Остались *технические* сложности: как обращаться с гигантской размерностью. Но в них-то всё и дело.

Основная идея и схема работы SVM

- Тривиальная схема алгоритма классификации такова:
  - входной вектор **x** трасформируется во входной вектор в feature space (большой размерности);
  - в этом большом пространстве мы вычисляем опорные векторы, решаем задачу разделения;
  - потом по этой задаче классифицируем входной вектор.
- Это нереально, потому что пространство слишком большой размерности.

Основная идея и схема работы SVM

- Оказывается, кое-какие шаги здесь можно переставить. Вот так:
  - опорные векторы вычисляются в исходном пространстве малой размерности;
  - там же они перемножаются (сейчас увидим, что это значит);
  - и только потом мы делаем нелинейную трансформацию того, что получится;
  - потом по этой задаче классифицируем входной вектор.
- Осталось теперь объяснить, что всё это значит. :)

Постановка задачи

- Напомним, что наша задача поставлена следующим образом:

$$\min_{\alpha} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} y_i y_j \alpha_i \alpha_j \left(\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j \right) - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i, \right.$$
$$\left. \text{где } \sum_{i=1}^{m} y_i \alpha_i = 0, \quad 0 \leq \alpha_i \leq C. \right\}$$

Постановка задачи

- Мы теперь хотим ввести некое отображение $\theta : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^N$, $N > n$. Получится:

$$\min_{\alpha} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} y_i y_j \alpha_i \alpha_j \left(\theta(\mathbf{x}_i) \cdot \theta(\mathbf{x}_j) \right) - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i, \right.$$
$$\left. \text{где } \sum_{i=1}^{m} y_i \alpha_i = 0, \quad 0 \leq \alpha_i \leq C. \right\}$$

Теория Гильберта–Шмидта–Мерсера

- Придётся немножко вспомнить (или изучить) функциональный анализ.
- Мы хотим обобщить понятие *скалярного произведения*; давайте введём новую функцию, которая (минуя трансформацию) будет сразу вычислять скалярное произведение векторов в feature space:

$$k(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \theta(\mathbf{u}) \cdot \theta(\mathbf{v}).$$

Теория Гильберта–Шмидта–Мерсера

- Первый результат: любая симметрическая функция $k(\mathsf{u}, \mathsf{v}) \in L_2$ представляется в виде

$$k(\mathsf{u}, \mathsf{v}) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \theta_i(\mathsf{u}) \cdot \theta_i(\mathsf{v}),$$

где $\lambda_i \in \mathbb{R}$ — собственные числа, а θ_i — собственные векторы интегрального оператора с ядром k, т.е.

$$\int k(\mathsf{u}, \mathsf{v}) \theta_i(\mathsf{u}) \mathrm{d}\mathsf{u} = \lambda_i \theta_i(\mathsf{v}).$$

Теория Гильберта–Шмидта–Мерсера

- Чтобы k задавало скалярное произведение, достаточно, чтобы все собственные числа были положительными. А собственные числа положительны тогда и только тогда, когда (*теорема Мерсера*)

$$\int \int k(\mathsf{u}, \mathsf{v}) g(\mathsf{u}) g(\mathsf{v}) \mathrm{d}\mathsf{u} \mathrm{d}\mathsf{v} > 0$$

  для всех g таких, что $\int g^2(\mathsf{u}) \mathrm{d}\mathsf{u} < \infty$.

- Вот, собственно и всё. Теперь мы можем вместо подсчёта $\theta(\mathsf{u}) \cdot \theta(\mathsf{v})$ в задаче квадратичного программирования просто использовать подходящее *ядро* $k(\mathsf{u}, \mathsf{v})$.

Теория Гильберта–Шмидта–Мерсера

- Итого задача наша выглядит так:

$$\min_{\alpha} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} y_i y_j \alpha_i \alpha_j k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i, \right.$$
$$\left. \text{где } \sum_{i=1}^{m} y_i \alpha_i = 0, \quad 0 \leq \alpha_i \leq C. \right\}$$

- Просто меняя ядро k, мы можем вычислять самые разнообразные разделяющие поверхности.
- Условия на то, чтобы k была подходящим ядром, задаются теоремой Мерсера.

Примеры ядер

- Рассмотрим ядро
$$k(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})^2.$$
- Какое пространство ему соответствует?

Примеры ядер

- После выкладок получается:

$$k(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})^2 = \\ = \left(u_1^2, u_2^2, \sqrt{2}u_1u_2\right) \cdot \left(v_1^2, v_2^2, \sqrt{2}v_1v_2\right).$$

- Иначе говоря, линейная поверхность в новом пространстве соответствует квадратичной поверхности в исходном (эллипс, например).

Примеры ядер

- Естественное обобщение: ядро $k(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})^d$ задаёт пространство, оси которого соответствуют всем *однородным* мономам степени d.
- А как сделать пространство, соответствующее произвольной полиномиальной поверхности, не обязательно однородной?

Примеры ядер

- Поверхность, описывающаяся полиномом степени d:

$$k(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + 1)^d.$$

- Тогда линейная разделимость в feature space в точности соответствует полиномиальной разделимости в базовом пространстве.

Примеры ядер

- Нормальное распределение (radial basis function):

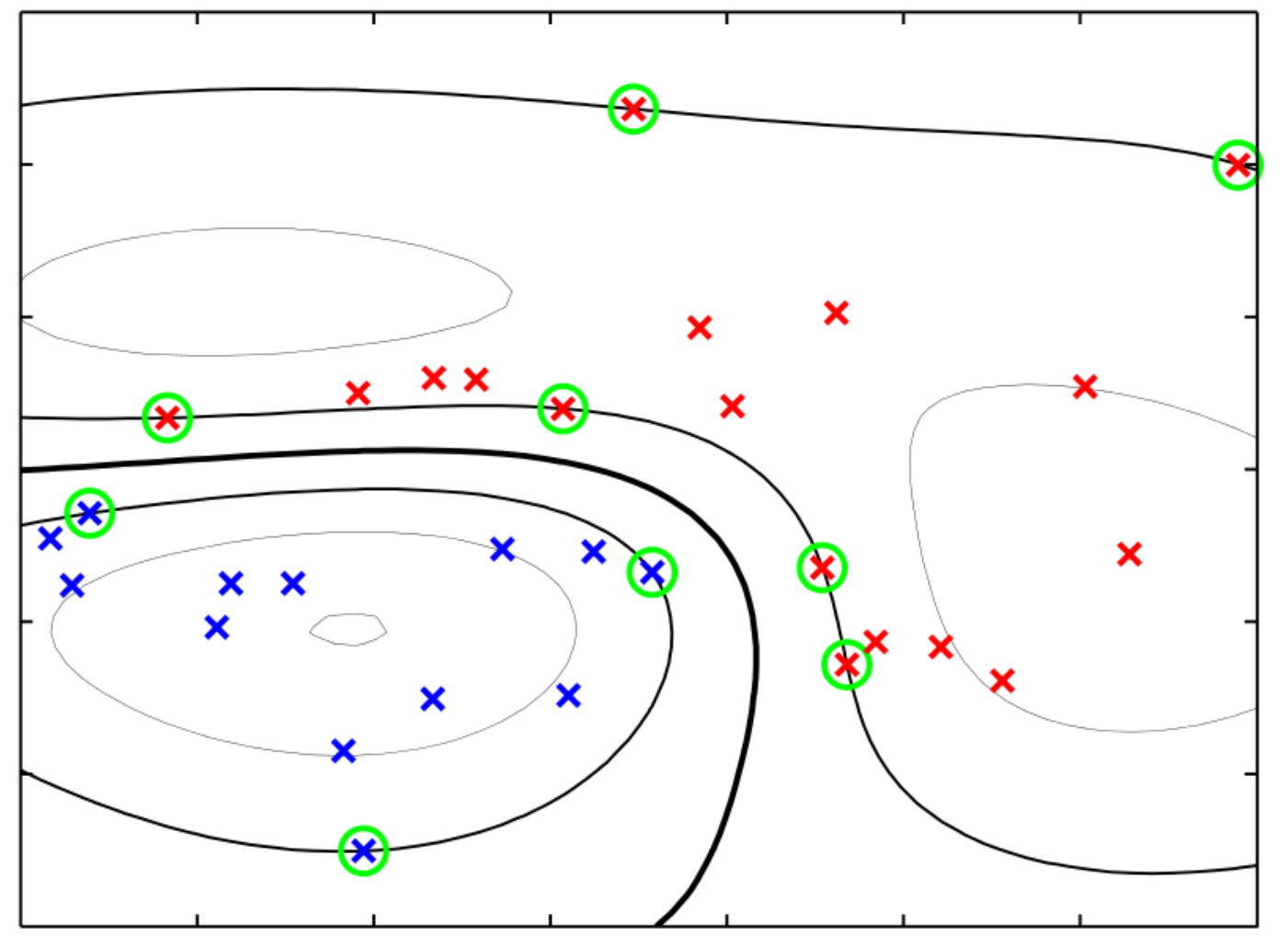
$$k(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = e^{-\frac{||\mathbf{u}-\mathbf{v}||^2}{2\sigma}}.$$

- Двухуровневая нейронная сеть:

$$k(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = o(\eta \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + c),$$

где o — сигмоид.

Пример



Резюме

- Вот какой получается в итоге алгоритм.
  1. Выбрать параметр C, от которого зависит акцент на минимизации ошибки или на максимизации зазора.
  2. Выбрать ядро и параметры ядра, которые у него, возможно, есть.
  3. Решить задачу квадратичного программирования.
  4. По полученным значениям опорных векторов определить w_0 (как именно?).
  5. Новые точки классифицировать как

$$f(\mathbf{x}) = \operatorname{sign}\Big(\sum_i y_i \alpha_i k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) - w_0\Big).$$

ν-SVM

- Другой вариант для неразделимых данных – ν-SVM [Schölkopf et al., 2000].
- Максимизируем

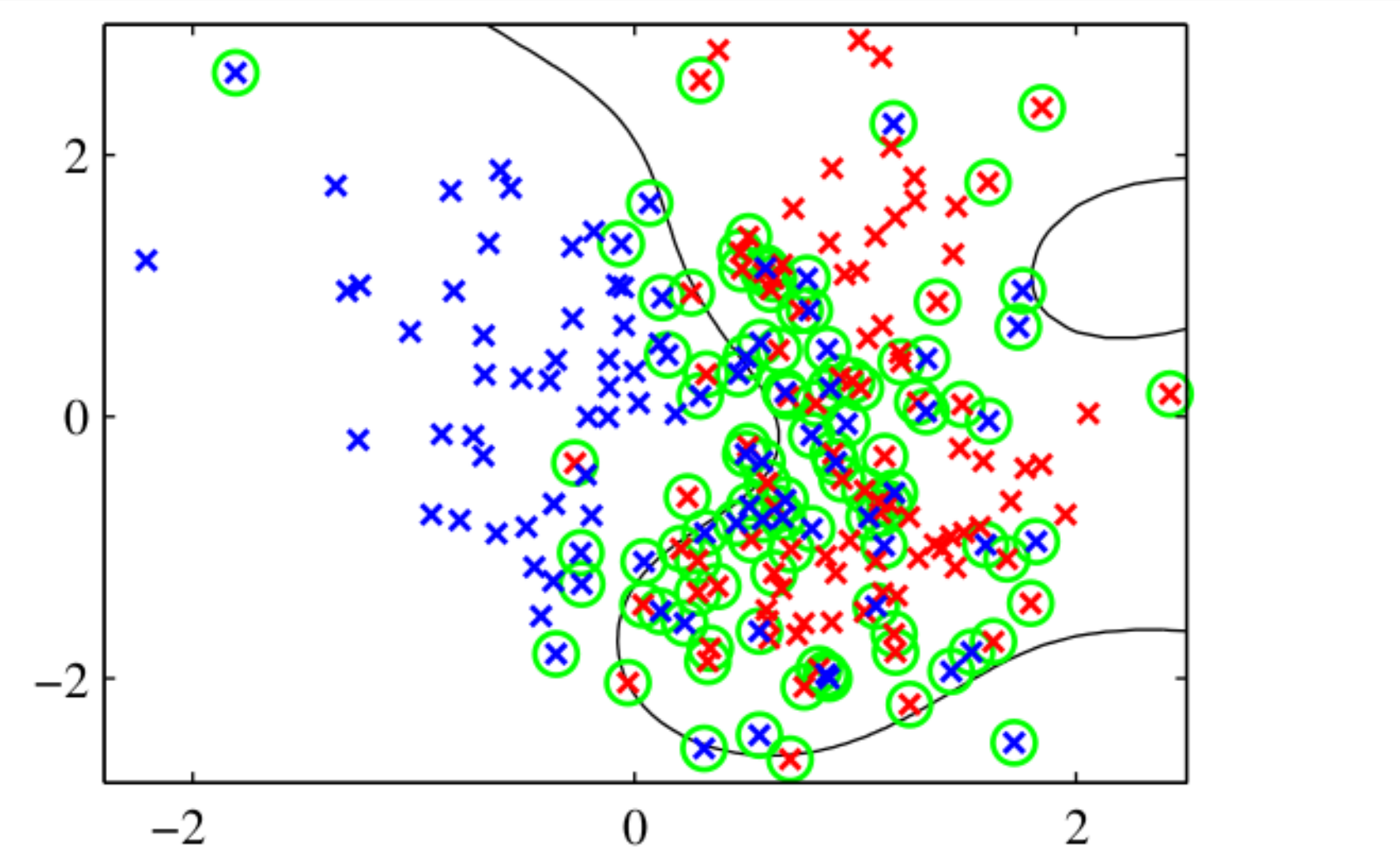
$$L(\mathbf{a}) = -\frac{1}{2}\sum_n\sum_m a_n a_m t_n t_m k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m)$$

  с ограничениями

$$0 \leq a_n \leq \frac{1}{N},\ \sum_n a_n t_n = 0,\ \sum_n a_n \geq \nu.$$

- Параметр ν можно интерпретировать как верхнюю границу на долю ошибок.

SVM для классификации



Связь с логистической регрессией

- В случае SVM с возможными ошибками мы минимизируем

$$C\sum_{n=1}^{N}\xi_n + \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2.$$

- Для точек с правильной стороны $\xi_n = 0$, с неправильной – $\xi_n = 1 - y_n t_n$.
- Так что можно записать *hinge error function* $E_{SV}(y_n t_n) = [1 - y_n t_n]_+$ и переписать как задачу с регуляризацией

$$\sum_{n=1}^{N} E_{SV}(y_n t_n) + \lambda\|\mathbf{w}\|^2.$$

Связь с логистической регрессией

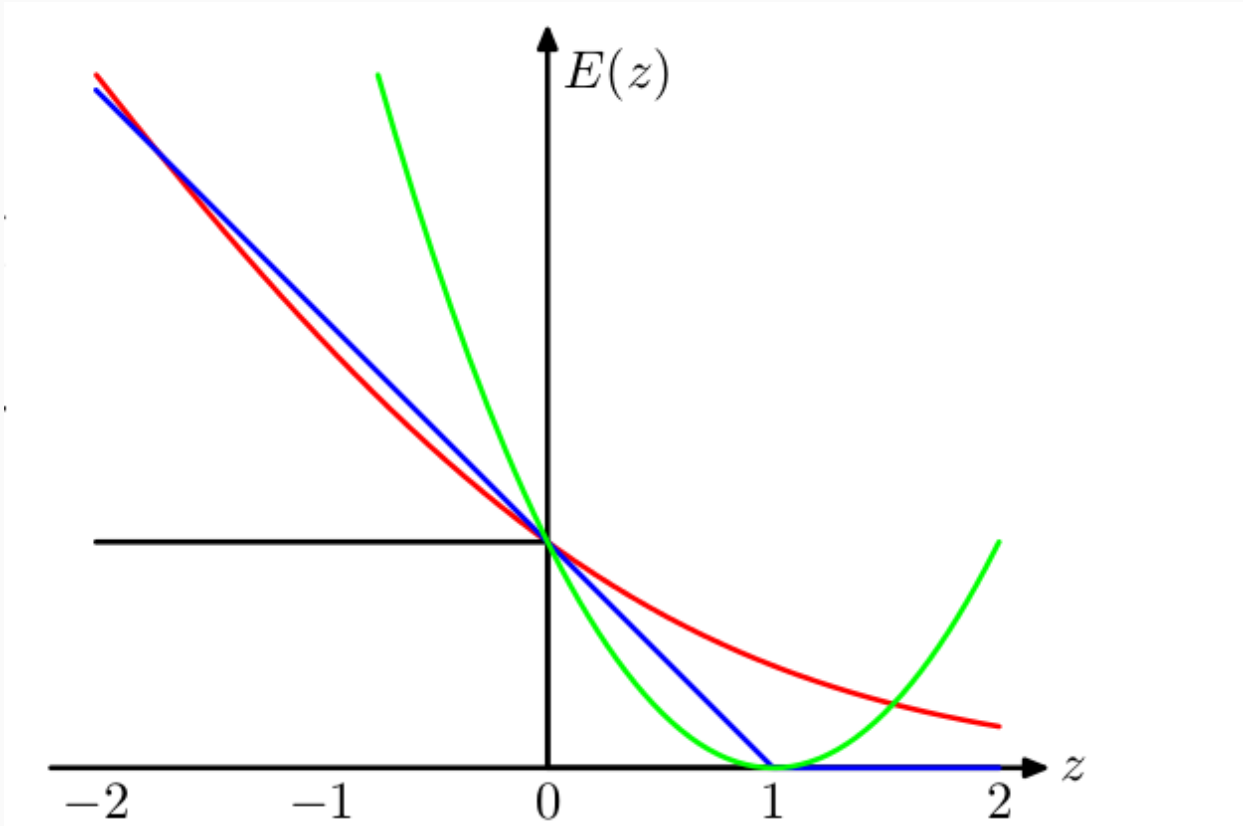
- Вспомним логистическую регрессию и переформулируем её для целевой переменной $t \in \{-1, 1\}$: $p(t = 1 \mid y) = \sigma(y)$, значит, $p(t = -1 \mid y) = 1 - \sigma(y) = \sigma(-y)$, и $p(t \mid y) = \sigma(yt)$.
- И логистическая регрессия – это минимизация

$$\sum_{n=1}^{N} E_{LR}(y_n t_n) + \lambda \|\mathbf{w}\|^2,$$

где $E_{LR}(y_n t_n) = \ln\left(1 + e^{-yt}\right)$.

Связь с логистической регрессией

- График hinge error function, вместе с функцией ошибки для логистической регрессии:



SVM с несколькими классами

- Как обобщить SVM на несколько классов? Варианты (без подробностей):
  1. обучить одну против всех и классифицировать $y(\mathbf{x}) = \max_k y_k(\mathbf{x})$ (нехорошо, потому что задача становится несбалансированной, и $y_k(\mathbf{x})$ на самом деле несравнимы);
  2. можно сформулировать единую функцию для всех K SVM одновременно, но обучение становится гораздо медленнее;
  3. можно обучить попарно $K(K-1)/2$ классификаторов, а потом считать голоса – кто победит;
  4. DAGSVM: организуем попарные классификаторы в граф и будем идти по графу, для классификации выбирая очередной вопрос;
  5. есть даже методы, основанные на кодах, исправляющих ошибки.

SVM с одним классом

- SVM также можно использовать с *одним* классом.
- Как и зачем?

SVM с одним классом

- SVM также можно использовать с *одним* классом.
- Как и зачем?
- Можно при помощи SVM очертить границу области высокой плотности.
- Тем самым найдём выбросы данных (outliers).
- Задача будет такая: найти наименьшую поверхность (сферу, например), которая содержит все точки, кроме доли ν.

SVM для регрессии

- SVM можно использовать для регрессии, сохраняя свойство разреженности (т.е. то, что SVM зависит только от опорных векторов).
- В обычной линейной регрессии мы минимизировали

$$\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}(y_n - t_n)^2 + \frac{\lambda}{2}\|\mathbf{w}\|^2.$$

- В SVM мы сделаем так: если мы попадаем в ϵ-окрестность предсказания, то ошибки, будем считать, совсем нет.

SVM для регрессии

- ϵ-insensitive error function:

$$E_\epsilon(y(\mathbf{x}) - t) = \begin{cases} 0, & |y(\mathbf{x}) - t| < \epsilon, \\ |y(\mathbf{x}) - t| - \epsilon & \text{иначе.} \end{cases}$$

- И задача теперь выглядит как минимизация

$$C \sum_{n=1}^{N} E_\epsilon \left(y(\mathbf{x}_n) - t_n \right) + \frac{\lambda}{2} \|\mathbf{w}\|^2.$$

SVM для регрессии

- Чтобы переформулировать, нужны по две slack переменные, для обеих сторон «трубки»:

$$y(\mathbf{x}_n) - \epsilon \leq t_n \leq y(\mathbf{x}_n) + \epsilon$$

превращается в

$$t_n \leq y(\mathbf{x}_n) + \epsilon + \xi_n,$$
$$t_n \geq y(\mathbf{x}_n) - \epsilon - \hat{\xi}_n,$$

и мы оптимизируем

$$C \sum_{n=1}^{N} E_\epsilon \left(\xi_n + \hat{\xi}_n \right) + \frac{\lambda}{2} \|\mathbf{w}\|^2.$$

SVM для регрессии

- Если же теперь пересчитать дуальную задачу, то получится

$$L(\mathbf{a}, \hat{\mathbf{a}}) = -\frac{1}{2}\sum_n\sum_m (a_n - \hat{a}_n)(a_m - \hat{a}_m)\, k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m) - \\ - \epsilon\sum_{n=1}^{n}(a_n + \hat{a}_n) + \sum_{n=1}^{N}(a_n - \hat{a}_n)\, t_n,$$

и мы её минимизируем по $a_n, \hat{a}_n$ с условиями

$$0 \leq a_n \leq C,$$
$$0 \leq \hat{a}_n \leq C,$$
$$\sum_{n=1}^{N}(a_n - \hat{a}_n) = 0.$$

SVM для регрессии

- Когда решим эту задачу, сможем предсказывать новые значения как

$$y(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{N} (a_n - \hat{a}_n)\, k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_n) + b,$$

где b можно найти как

$$b = t_n - \epsilon - \mathbf{w}^\top \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_n) =$$

$$= t_n - \epsilon - \sum_{m=1}^{N} (a_m - \hat{a}_m)\, k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m).$$

SVM для регрессии

- А условия ККТ превращаются в

$$
\begin{aligned}
a_n \left(\epsilon + \xi_n + y(\mathbf{x}_n) - t_n\right) &= 0, \\
\hat{a}_n \left(\epsilon + \hat{\xi}_n - y(\mathbf{x}_n) + t_n\right) &= 0, \\
(C - a_n)\xi_n &= 0, \\
(C - \hat{a}_n)\hat{\xi}_n &= 0.
\end{aligned}
$$

- Отсюда очевидно, что либо a_n, либо $\hat{a}_n$ всегда равны 0, и хотя бы один из них не равен, только если точка лежит на или за границей «трубки».
- Опять получили решение, зависящее только от «опорных векторов».

SVM для регрессии

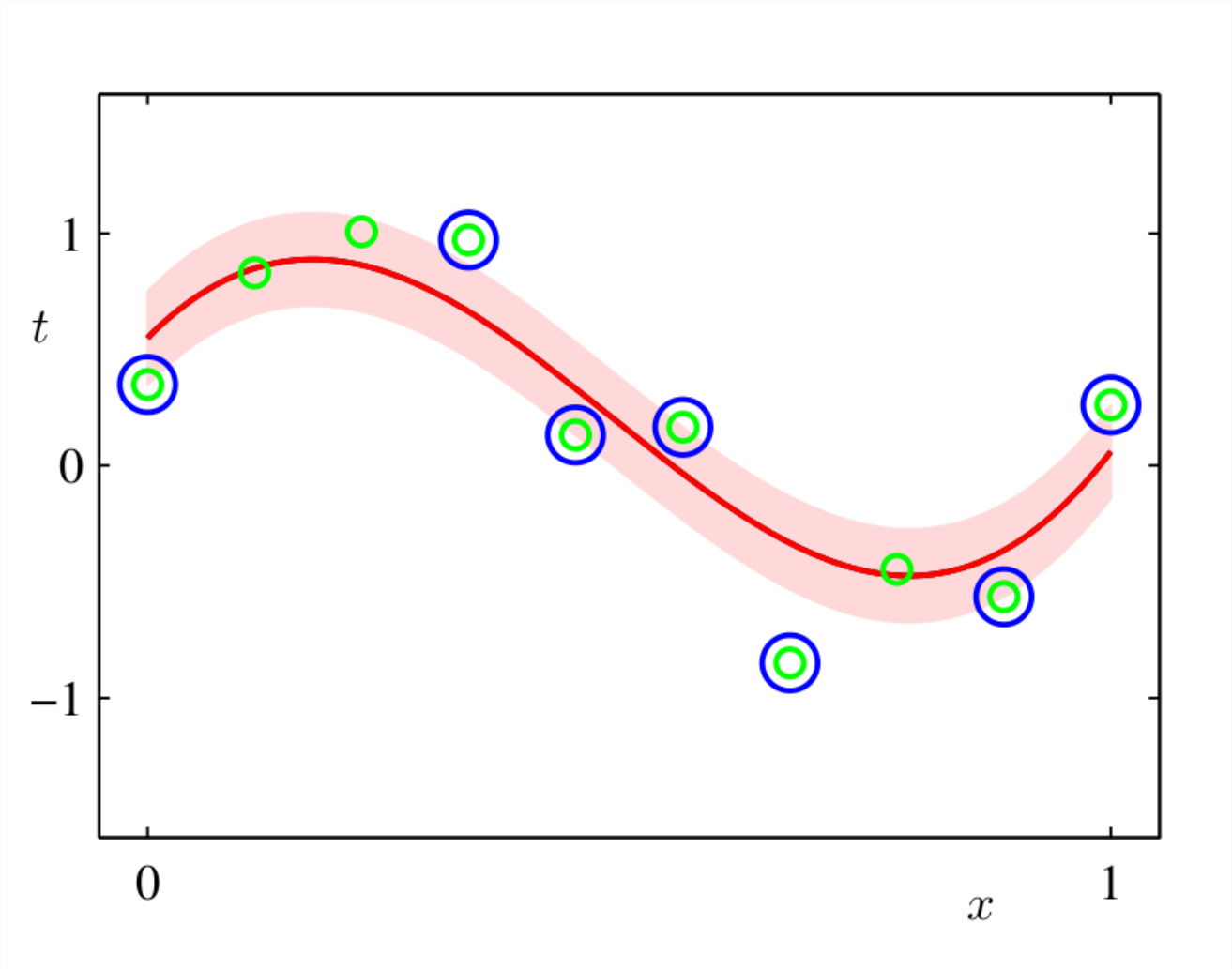
- Но снова можно переформулировать в виде ν-SVM, в котором параметр более интуитивно ясен: вместо ширины трубки ϵ рассмотрим ν – долю точек, лежащих вне трубки; тогда минимизировать надо

$$L(\mathbf{a}) = -\frac{1}{2}\sum_n\sum_m (a_n - \hat{a}_n)(a_m - \hat{a}_m)\, k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m) + \sum_{n=1}^{N}(a_n - \hat{a}_n)\, t_n$$

при условиях

$$\begin{aligned} 0 \le a_n \le \tfrac{C}{N}, \qquad & \textstyle\sum_{n=1}^{N}(a_n - \hat{a}_n) = 0, \\ 0 \le \hat{a}_n \le \tfrac{C}{N}, \qquad & \textstyle\sum_{n=1}^{N}(a_n + \hat{a}_n) \le \nu C. \end{aligned}$$

SVM для регрессии



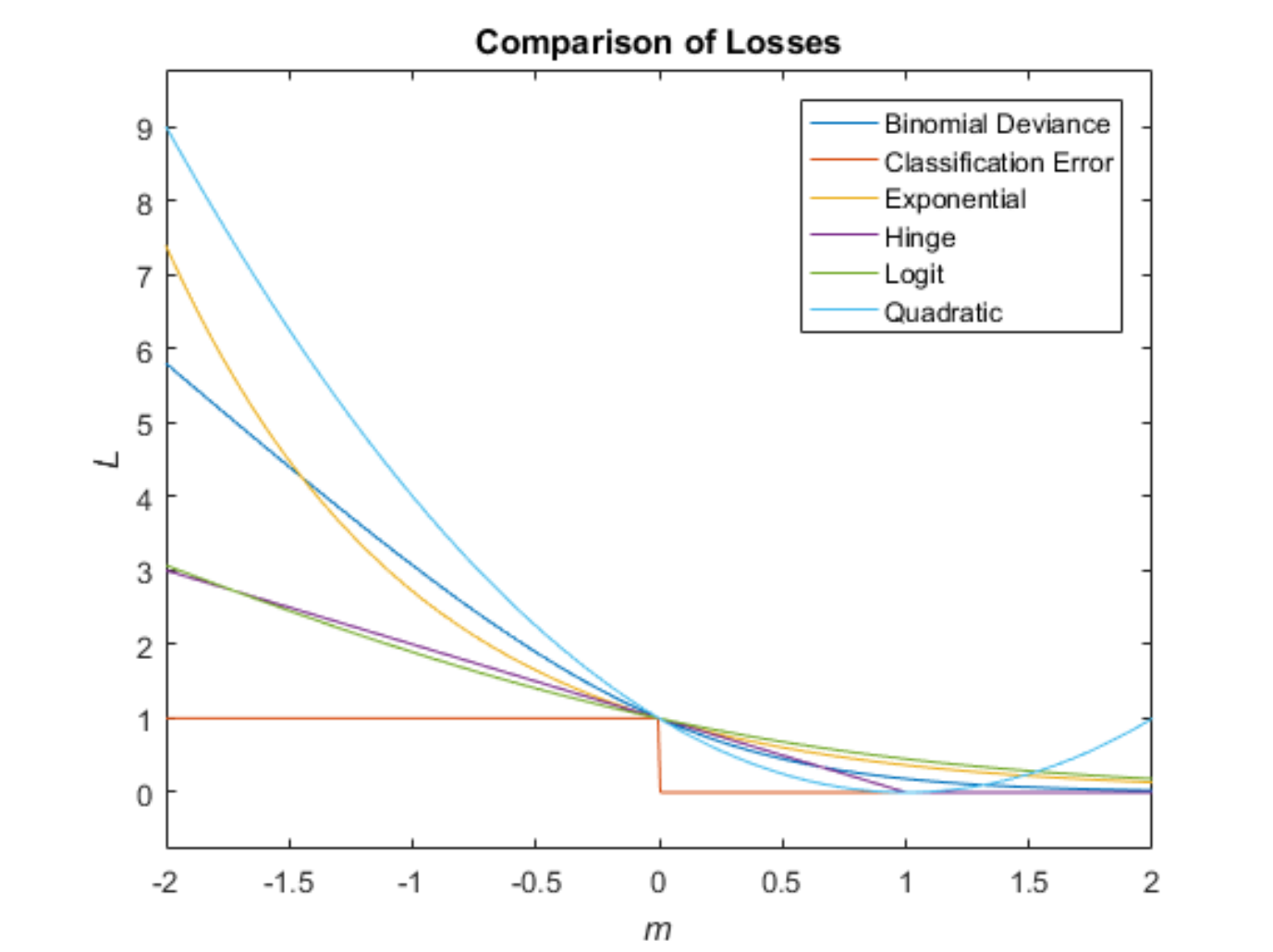
Практика

- На практике:
  - маленький C – гладкая разделяющая поверхность, мало опорных векторов;
  - большой C – сложная разделяющая поверхность, много опорных векторов.
- Для RBF ядра:
  - маленькое γ – опорные векторы влияют далеко, модель более простая;
  - большое γ – опорные векторы влияют только непосредственно рядом, модель более сложная.

Функции потерь в классификации

- И напоследок немножко другой взгляд: разные методы классификации отличаются друг от друга тем, какую функцию ошибки они оптимизируют.
- У классификации проблема с «правильной» функцией ошибки, то есть ошибкой собственно классификации:
  - она и не везде дифференцируема,
  - и производная её никому не нужна.
- Давайте посмотрим на разные функции потерь (loss functions); мы уже несколько видели, ещё кое-что осталось.

Функции потерь в классификации



Байесовский вывод для гауссиана

Нормальное распределение: фиксируем σ

- Многое из того, что мы делали — это был байесовский вывод для нормального распределения:

$$p(x_1, \ldots, x_n \mid \mu, \sigma^2) \propto \frac{1}{\sigma^n} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_i (x_i - \mu)^2\right).$$

- Хотим: найти сопряжённое априорное распределение, подсчитать правдоподобие, решить задачу предсказания.
- Для начала зафиксируем σ^2 и будем в качестве параметра рассматривать только μ.

Нормальное распределение: фиксируем σ

- Сопряжённое априорное распределение для μ при фиксированном σ^2 тоже нормальное и выглядит как

$$p(\mu \mid \mu_0, \sigma_0^2) \propto \frac{1}{\sigma_0^n} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_0^2}(\mu - \mu_0)^2\right).$$

- Обычно выбирают $\mu_0 = 0$, $\sigma_0^2 \to \infty$ (порой буквально).
- Давайте рассмотрим сначала случай ровно одного наблюдения x и найдём $p(\mu \mid x)$.

Нормальное распределение: фиксируем σ

- При нашем априорном распределении у μ и x совместное нормальное распределение:

$$x = \mu + \sigma\epsilon, \quad \mu = \mu_0 + \sigma_0\delta, \quad \epsilon, \delta \sim \mathcal{N}(0, 1).$$

Упражнение. Пусть (z_1, z_2) – случайные величины с совместным нормальным распределением. Докажите, что случайная величина $z_1 \mid z_2$ распределена нормально с параметрами

$$E(z_1 \mid z_2) = E(z_1) + \frac{Cov(z_1, z_2)}{Var(z_2)}\left(z_2 - E(z_2)\right),$$

$$Var(z_1 \mid z_2) = Var(z_1) - \frac{Cov^2(z_1, z_2)}{Var(z_2)}$$

$(Var(x) = E\left[(x - Ex)^2\right], Cov(x, y) = E\left[(x - Ex)(y - Ey)\right])$.

Нормальное распределение: фиксируем σ

- В нашем случае:

$$
\begin{aligned}
x = \mu + \sigma\epsilon, \quad \mu = \mu_0 + \sigma_0\delta, \quad \epsilon, \delta \sim \mathcal{N}(0,1),\\
E(x) = \mu_0,\\
Var(x) = E(Var(x \mid \mu)) + Var(E(x \mid \mu)) = \sigma^2 + \sigma_0^2,\\
Cov(x, \mu) = E\left[(x - \mu_0)(\mu - \mu_0)\right] = \sigma_0^2.
\end{aligned}
$$

- Применив упражнение, получаем:

$$
\begin{aligned}
E(\mu \mid x) = \mu_0 + \frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}(x - \mu_0) = \frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}x + \frac{\sigma^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}\mu_0,\\
Var(\mu \mid x) = \frac{\sigma^2\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2} = \frac{1}{\frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{1}{\sigma^2}}.
\end{aligned}
$$

Нормальное распределение: фиксируем σ

- Итого:

$$p(\mu \mid x) \sim \mathcal{N}\left(\frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2} x + \frac{\sigma^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}\mu_0, \left(\frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{1}{\sigma^2}\right)^{-1}\right).$$

- Опять же, сложные вычисления можно забыть и пользоваться этими формулами.
- Замечание: часто используют $\tau = \frac{1}{\sigma^2}$ как параметр нормального распределения (precision). Тогда

$$\tau_{\mu|x} = \tau_\mu + \tau.$$

Нормальное распределение: фиксируем σ

- А что, если данных больше, $x_1, \ldots, x_n$?
- Тогда можно повторить всё то же самое, а можно заметить, что набор данных описывается своим средним.

Упражнение. Докажите, что если $p(x_i \mid \mu) \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ и x_i независимы, то $p(\bar{x} \mid \mu) \sim \mathcal{N}(\mu, \frac{\sigma^2}{n})$.

Нормальное распределение: фиксируем σ

- Для апостериорной вероятности будет

$$p(\mu \mid x_1, \ldots, x_n) \propto p(x_1, \ldots, x_n \mid \mu) p(\mu) \propto p(\bar{x} \mid \mu) p(\mu) \propto p(\mu \mid \bar{x}).$$

- Подставляя в наш предыдущий результат, получим:

$$p(\mu \mid x_1, \ldots, x_n) \sim \mathcal{N}\left(\frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \frac{\sigma^2}{n}} x + \frac{\sigma^2}{n\sigma_0^2 + \sigma^2}\mu_0, \left(\frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{n}{\sigma^2}\right)^{-1}\right).$$

Нормальное распределение: фиксируем μ

- Если зафиксировать μ и менять σ^2, то сопряжённым априорным распределением будет обратное гамма-распределение:

$$p(\sigma^2 \mid \alpha, \beta) \propto IG(\alpha, \beta) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} z^{-\alpha-1} \exp\left(\frac{-\beta}{z}\right).$$

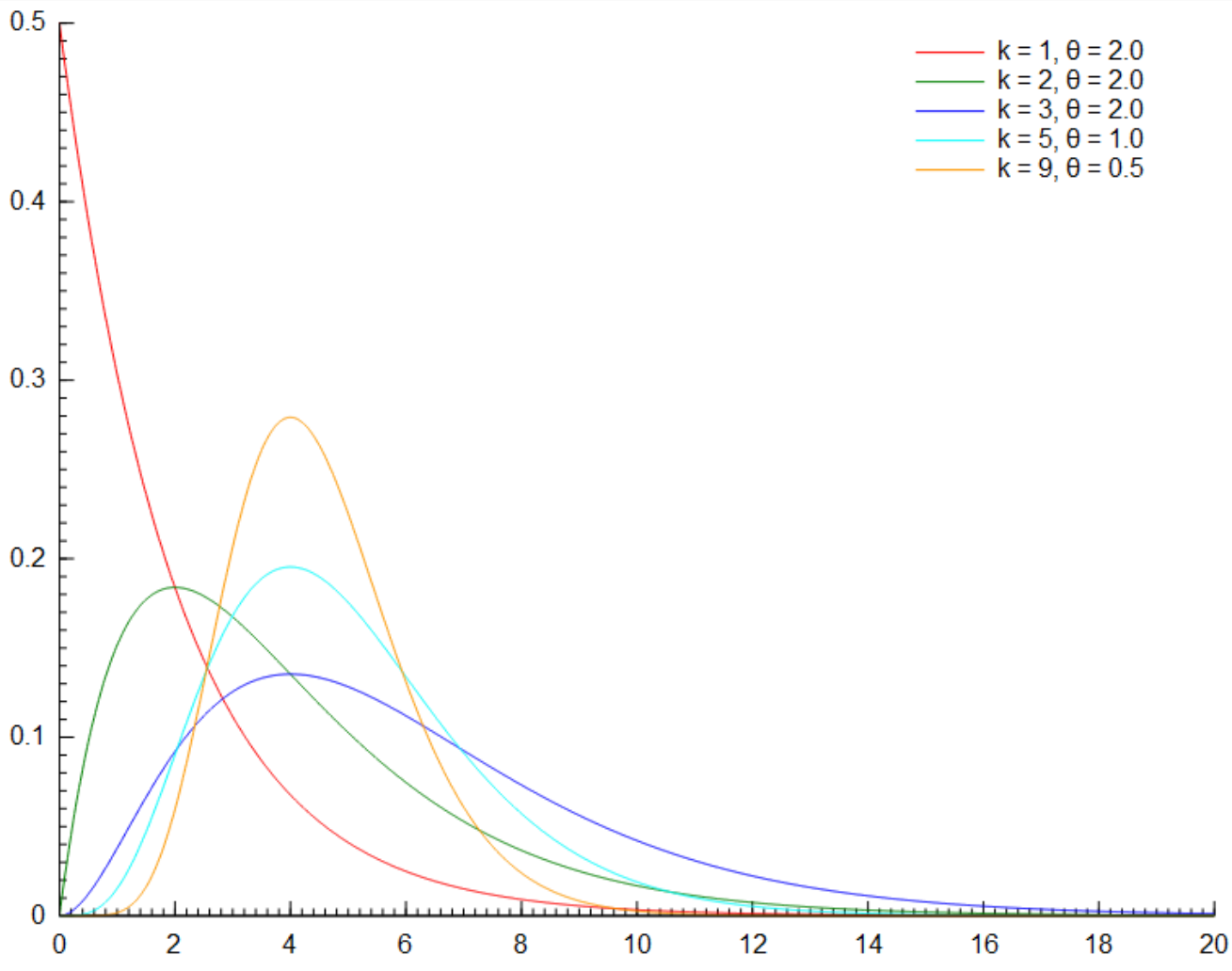
- Тогда в апостериорном распределении будет

$$p(\sigma^2 \mid x_1, \ldots, x_n, \alpha, \beta) \propto IG\left(\alpha + \frac{n}{2}, \beta + \frac{1}{2}\sum (x_i - \mu)\right).$$

- А в терминах $\tau = \frac{1}{\sigma^2}$ будет обычное гамма-распределение:

$$p(\tau \mid x_1, \ldots, x_n, \alpha, \beta) \propto \mathrm{Gamma}\left(\alpha + \frac{n}{2}, \beta + \frac{1}{2}\sum (x_i - \mu)\right).$$

Гамма-распределение



Когда и μ, и σ^2 меняются

- Что делать, когда и μ, и σ^2 меняются?
- Можно было бы предположить, что μ и σ^2 независимы; тогда просто априорное распределение будет

$$p(\mu, \sigma \mid \mu_0, \sigma_0, \alpha, \beta) \propto \mathcal{N}(\mu_0, \sigma_0^2) \cdot IG(\alpha, \beta).$$

- К сожалению, это распределение не будет сопряжённым к нормальному. Почему?

Когда и μ, и σ^2 меняются

- Что делать, когда и μ, и σ^2 меняются?
- Можно было бы предположить, что μ и σ^2 независимы; тогда просто априорное распределение будет

$$p(\mu, \sigma \mid \mu_0, \sigma_0, \alpha, \beta) \propto \mathcal{N}(\mu_0, \sigma_0^2) \cdot IG(\alpha, \beta).$$

- К сожалению, это распределение не будет сопряжённым к нормальному. Почему?
- Потому что μ и σ^2 зависимы. :) Новая точка x вводит зависимость между ними.
- В результате получается распределение Стьюдента.

Экспоненциальное семейство

- Вообще говоря, всё, о чём мы говорили – частные случаи *экспоненциального семейства* распределений:

$$p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\eta}) = h(\mathbf{x})g(\boldsymbol{\eta})e^{\boldsymbol{\eta}^\top \mathbf{u}(\mathbf{x})}.$$

- $\boldsymbol{\eta}$ называются *естественными параметрами* (natural parameters).

Экспоненциальное семейство

- Например, распределение Бернулли:

$$p(x \mid \mu) = \mu^x (1-\mu)^{1-x} = e^{x \ln \mu + (1-x)\ln(1-\mu)} = \\ = (1-\mu) e^{\ln\left(\frac{\mu}{1-\mu}\right) x},$$

и естественный параметр получился $\eta = \ln\left(\frac{\mu}{1-\mu}\right)$:

$$p(x \mid \boldsymbol{\eta}) = \sigma(-\eta) e^{-\eta x},$$

где $\sigma(y) = \frac{1}{1+e^{-y}}$ – *сигмоид-функция.*

Экспоненциальное семейство

- Для мультиномиального распределения с параметрами $\mu_1, \ldots, \mu_{M-1}$ получаются

$$\eta_k = \ln\left(\frac{\mu_k}{1 - \sum_j \mu_j}\right) \text{ и}$$

$$p(\mathbf{x} \mid \eta) = \left(1 + \sum_{k=1}^{M-1} e^{\eta_k}\right)^{-1} e^{\boldsymbol{\eta}^\top \mathbf{x}}.$$

Упражнение. Проверьте!

Экспоненциальное семейство

- Так вот, для распределений из экспоненциального семейства

$$p(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\eta}) = h(\mathbf{x})g(\boldsymbol{\eta})e^{\boldsymbol{\eta}^\top \mathbf{u}(\mathbf{x})}$$

можно сразу оптом найти сопряжённые априорные распределения:

$$p(\boldsymbol{\eta} \mid \boldsymbol{\chi}, \nu) = f(\boldsymbol{\chi}, \nu)g(\boldsymbol{\eta})^\nu e^{\nu\boldsymbol{\eta}^\top \boldsymbol{\chi}},$$

где $\boldsymbol{\chi}$ – гиперпараметры, а g то же самое, что в исходном распределении.

Упражнение. Проверьте это и получите вышеописанные примеры как частные случаи.

Когда и μ, и σ^2 меняются

- В настоящем сопряжённом априорном распределении будут:

$$\begin{aligned} x \mid \mu, \tau &\sim \mathcal{N}(\mu, \tau), \\ \mu \mid \tau &\sim \mathcal{N}(\mu_0, n_0\tau), \\ \tau &\sim G(\alpha, \beta). \end{aligned}$$

- Давайте выясним, как изменятся параметры, и заодно докажем.

Когда и μ, и σ^2 меняются

- Самое простое – это, по уже известным результатам,

$$\mu \mid x, \tau \sim \mathcal{N}\left(\frac{n\tau}{n\tau + n_0\tau}\bar{x} + \frac{n_0\tau}{n\tau + n_0\tau}\mu_0, n\tau + n_0\tau\right).$$

- Затем давайте разберёмся с $\tau \mid x$:

$$p(\tau, \mu \mid x) \propto p(\tau) \cdot p(\mu \mid \tau) \cdot p(x \mid \tau, \mu),$$

  и мы хотим это распределение маргинализовать по μ...

Когда и μ, и σ^2 меняются

- Подсчитаем:

$$
\begin{aligned}
p(\tau, \mu \mid x) &\propto p(\tau) \cdot p(\mu \mid \tau) \cdot p(x \mid \tau, \mu) \\
&\propto \tau^{\alpha-1} e^{-\tau\beta} \cdot \tau^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{n_0\tau}{2}(\mu-\mu_0)^2} \cdot \tau^{\frac{n}{2}} e^{-\frac{\tau}{2}\sum(x_i-\mu)^2} \\
&\propto \tau^{\alpha+\frac{n}{2}-\frac{1}{2}} e^{-\tau\left(\beta+\frac{1}{2}\sum(x_i-\bar{x})^2\right)} e^{-\frac{\tau}{2}\left(n_0(\mu-\mu_0)^2+n(\bar{x}-\mu)^2\right)}
\end{aligned}
$$

(простой трюк: $x_i - \mu = x_i - \bar{x} + \bar{x} - \mu$).

Когда и μ, и σ^2 меняются

- Теперь надо проинтегрировать

$$\int_{\mu} e^{-\frac{\tau}{2}\left(n_0(\mu-\mu_0)^2+n(\bar{x}-\mu)^2\right)} d\mu.$$

Упражнение. Проинтегрируйте. :) Должна получиться нормировочная константа

$$\tau^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{-nn_0\tau}{2(n+n_0)}(\bar{x}-\mu_0)^2}.$$

Когда и μ, и σ^2 меняются

- Таким образом, получается апостериорное распределение

$$p(\tau \mid x) \propto \tau^{\alpha+\frac{n}{2}-1} e^{-\tau\left(\beta+\frac{1}{2}\sum(x_i-\bar{x})^2+\frac{nn_0}{2(n+n_0)}(\bar{x}-\mu_0)^2\right)}.$$

- Итого результаты такие:

$$\begin{aligned}
\mu \mid \tau, x &\sim \mathcal{N}\left(\tfrac{n\tau}{n\tau+n_0\tau}\bar{x}+\tfrac{n_0\tau}{n\tau+n_0\tau}\mu_0, n\tau+n_0\tau\right), \\
\tau \mid x &\sim G\left(\alpha+\tfrac{n}{2}, \beta+\tfrac{1}{2}\sum(x_i-\bar{x})^2+\tfrac{nn_0}{2(n+n_0)}(\bar{x}-\mu_0)^2\right).
\end{aligned}$$

Предсказание

- Теперь предсказание нового x_{new}:

$$p(x_{\text{new}} \mid x) = \int\int \underbrace{\text{Gamma}}_{\tau|x} \cdot \underbrace{\text{Gaussian}}_{\mu|\tau,x} \cdot \underbrace{\text{Gaussian}}_{x_{\text{new}}|\tau,\mu} d\tau d\mu =$$

$$= \int \underbrace{\text{Gamma}}_{\tau|x} \int \underbrace{\text{Gaussian}}_{\mu|\tau,x} \cdot \underbrace{\text{Gaussian}}_{x_{\text{new}}|\tau,\mu} d\tau d\mu =$$

$$= \int \underbrace{\text{Gamma}}_{\tau|x} \cdot \underbrace{\text{Gaussian}}_{x_{\text{new}}|\tau,x} d\tau = \dots$$

- В результате получится распределение Стьюдента.

Спасибо!

Спасибо за внимание!